

T.
(043)53
2020
Oj 2

TESIS CARRERA DE DOCTORADO EN FÍSICA

DINÁMICA NO LINEAL DE SUPERCONDUCTORES FUERA DE EQUILIBRIO

Hector Pablo Ojeda Collado
Doctorando

Dr. Carlos Balseiro
Director

Marzo de 2020

Teoría de la Materia Condensada – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

INVENTARIO: 24191

23.09.21

Biblioteca Leo Falicov

Índice de símbolos

BCS	Bardeen-Cooper-Schrieffer (creadores de la teoría BCS para la superconductividad)
DOS	Densidad de estados (del inglés <i>Density of States</i>)
ISRS	Dispersión Raman estimulada impulsiva (del inglés <i>Impulsive Stimulated Raman Scattering</i>)
NMR	Resonancia magnética nuclear (del inglés <i>Nuclear Magnetic Resonance</i>)
RWA	Aproximación de onda rotante (del inglés <i>Rotating Wave Approximation</i>)
CDW	Onda de densidad de carga (del inglés <i>Charge Density Waves</i>)
RAP	Pseudoespines de Anderson resonantes (del inglés <i>Resonant Anderson Pseudospins</i>)
trARPES	Espectroscopía de fotoemisión resuelta en ángulo y tiempo (del inglés <i>time-resolved and Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy</i>)
STM	Microscopía de barrido túnel (del inglés <i>Scanning Tunneling Microscopy</i>)
3D	tridimensional

Índice de contenidos

Índice de símbolos	i
Índice de contenidos	iii
Resumen	v
Abstract	vii
1. Introducción general	1
1.1. Introducción	1
1.2. Estructura de la tesis	5
2. Fases dinámicas del modelo de BCS ante perturbaciones súbitas	7
2.1. Modelo de BCS para la superconductividad	7
2.2. Pseudoespines de Anderson y ecuación de movimiento	11
2.3. Cambio súbito de la interacción atractiva	13
2.4. Integrabilidad del hamiltoniano BCS: vector Lax	17
3. Respuesta dinámica del superconductor acoplado a un baño térmico	21
3.1. Formalismo de Keldysh para incluir relajación de energía en presencia de un baño térmico	24
3.1.1. Funciones de Green fuera de equilibrio	24
3.1.2. Autoenergías en el límite de banda ancha: efectos de disipación en el superconductor	26
3.1.3. Estado de equilibrio en presencia de disipación	30
3.1.4. Justificación de la fórmula de Dynes	33
3.1.5. Dinámica fuera de equilibrio	35
3.2. Resultados	37
3.3. Conclusiones	40
4. Modos Rabi-Higgs en presencia de perturbaciones periódicas	43
4.1. Modelo	47

4.2. Mecanismos de excitación periódica en el superconductor	49
4.2.1. Modulación periódica de la DOS	49
4.2.1.1. Dispersión Raman estimulada impulsiva (ISRS) . . .	51
4.2.1.2. Radiación en el rango de los THz	54
4.2.2. Oscilaciones de la interacción atractiva mediada por fonones	55
4.2.3. Perturbaciones periódicas en átomos ultrafríos	56
4.3. Respuesta lineal	57
4.4. Respuesta no lineal y modos Rabi-Higgs	60
4.4.1. Resultados numéricos	60
4.4.2. Analogía con los experimentos de NMR	64
4.4.3. Consecuencias del modo Rabi-Higgs: inversión de población	66
4.4.4. Fase dinámica de superconductividad de <i>gap</i> nulo	69
4.5. Uso de las oscilaciones de Rabi-Higgs para generar las fases dinámi- cas del modelo de BCS	69
4.5.1. Resultados numéricos	71
4.6. Conclusiones	73
5. Dinámica no lineal del superconductor acoplado a un baño térmico y su posible detección usando espectroscopías con resolución temporal	77
5.1. Modos Rabi-Higgs en presencia de disipación provista por el baño .	79
5.1.1. Efectos no lineales en ausencia de un reservorio externo: mo- dos Rabi-Higgs y generación de segundos armónicos	80
5.1.2. Dinámica incluyendo relajación de energía	82
5.2. Simulación de tr-ARPES y STM: detección del modo Rabi-Higgs y otras no linealidades en el estado estacionario	88
5.2.1. tr-ARPES	89
5.2.1.1. Teoría de Floquet para el estado estacionario	90
5.2.2. Experimentos de tunelaje con resolución temporal	91
5.3. Resumen	95
Conclusiones generales y trabajo futuro	99
A. Apéndices	103
A.1. Mecanismos para inducir $\lambda(t)$ (caso del FeSe)	103
Bibliografía	105
Publicaciones asociadas	125
Agradecimientos	127

Resumen

En los últimos años, ha habido un creciente interés en la posibilidad de manipular el estado superconductor fuera del equilibrio. Dentro del formalismo de BCS, la mayoría de los trabajos teóricos han estudiado el problema de un cambio súbito en la interacción atractiva, suponiendo que el sistema se encuentra perfectamente aislado. El resultado más importante es la existencia de tres fases dinámicas diferentes, que corresponden respectivamente con una amortiguación, un sobreamortiguamiento u oscilaciones persistentes del parámetro de orden superconductor. Sin embargo, para describir correctamente sistemas reales de materia condensada y átomos fríos, es necesario tener en cuenta los efectos de disipación que aparecen debido a la presencia inevitable del medio ambiente: un desafío teórico que no ha sido resuelto hasta el momento para superconductores fuera de equilibrio y que hemos abordado en esta tesis. En este caso, sin importar cuán grande sea el cambio en la interacción atractiva, el parámetro de orden superconductor tiende al parámetro de orden de equilibrio que corresponde a la nueva interacción atractiva, en un tiempo característico que depende del acoplamiento con el baño externo (el baño externo absorbe toda la energía extra y permite al sistema alcanzar su estado fundamental a tiempos largos). Hemos demostrado que el proceso de termalización podría ocurrir en una escala de tiempo tal que la fase sincrónica (oscilaciones persistentes) y la fase de oscilaciones amortiguadas del parámetro de orden, difícilmente puedan ser distinguidas en los experimentos.

En la segunda parte de la tesis, estudiamos la dinámica fuera de equilibrio de un superconductor BCS en presencia de una perturbación periódica de alta frecuencia y un baño externo, en equilibrio, que agrega disipación al problema. Para tiempos cortos comparados con el tiempo de relajación de energía, un conjunto de excitaciones de cuasipartículas entra en resonancia y realiza oscilaciones de Rabi sincrónicas con una frecuencia que depende de la amplitud de la perturbación periódica. Como consecuencia, aparece un nuevo modo colectivo (modo Rabi-Higgs) en la dinámica transitoria del parámetro de orden superconductor. A tiempos largos, en el estado estacionario, este modo se desvanece y se produce una saturación en el desbalance de la población de cuasipartículas, análogo a lo que sucede en problemas de óp-

tica cuántica. Finalmente, se discute la viabilidad de dos técnicas experimentales basadas en fotoemisión y microscopía de efecto túnel para detectar oscilaciones de Rabi-Higgs. Aún en presencia de disipación debida al acoplamiento con el baño, se demuestra cómo ambas espectroscopías son apropiadas para la futura detección experimental de estas no linealidades.

Palabras clave: SUPERCONDUCTIVIDAD FUERA DE EQUILIBRIO, DINÁMICA EN PRESENCIA DE DISIPACIÓN, ESPECTROSCOPÍAS RESUELTAS EN TIEMPO.

Abstract

In the last few years, there has been a growing interest in the possibility to manipulate the superconducting state far from equilibrium. Within the BCS formalism, most of the theoretical works have studied the problem of a sudden change in the attractive interaction parameter by considering a perfect isolated system. The main finding is the existence of three different dynamical phases corresponding to damping, overdamping and persistent oscillations of the superconducting order parameter. However, to correctly describe real condensed matter systems and cold atoms, it is necessary to introduce dissipation effects due to the ubiquitous presence of environment: a theoretical challenge that remains unsolved so far which has been addressed in this thesis. In this case, no matter how strong the quench in the pairing interaction is, the order parameter reaches the equilibrium order parameter that corresponds with the new attractive interaction in a characteristic time which depends on the coupling to an external bath (the external bath absorbs the extra energy allowing the system to reach the ground state). We have demonstrated that the thermalization processes could take place on a time scale such that the synchronic phase (persistent oscillations) and the damping phase could hardly be distinguished in experiments.

In the second part of this thesis, we have studied the out-of-equilibrium dynamics of a BCS superconductor in the presence of a high-frequency periodic drive and an external bath, at equilibrium, providing dissipation. For short times compared with the energy relaxation time, a set of quasiparticle excitations enters into resonance and performs synchronous Rabi oscillations with a frequency that depends on the amplitude of the drive. As a consequence, a new collective mode (Rabi-Higgs mode) appears in the transient superconducting gap dynamic. At long-times, in the steady-state, this mode vanishes and saturation of the population imbalance takes place in the system, analogous to what happens in quantum optics problems. Finally, we discuss the feasibility of two experimental techniques based on photoemission and scanning tunneling microscopy to detect Rabi-Higgs oscillations. Even in the presence of dissipation due to the coupling with the bath, we demonstrate that both spectroscopies are well suited for the future experimental detection of these

nonlinearities.

Keywords: NONEQUILIBRIUM SUPERCONDUCTIVITY, DISSIPATIVE DYNAMICS, TIME-RESOLVED SPECTROSCOPIES.

Capítulo 1

Introducción general

1.1. Introducción

La interacción de la luz con la materia es un tópico recurrente en la Ciencia, que abarca disímiles áreas del conocimiento que van desde la Biología [1, 2], la Química [3, 4] hasta la Física de la Materia Condensada [5–13]. Su mayor uso ha estado orientado al estudio de las propiedades de los materiales mediante técnicas de espectroscopía o de transporte en las que se estimula al sistema con campos eléctricos de poca intensidad o en una escala de tiempo característica que es mayor que el tiempo de interacción entre los distintos grados de libertad del sistema (la relajación es muy rápida comparada con el estímulo externo). Esto conduce, desde el punto de vista teórico, a la utilización de formalismos de cuasi-equilibrio en los que es válido usar la física estadística convencional.

En los últimos años, el extraordinario avance en el campo de la óptica no lineal y las tecnologías láser ha hecho posible la utilización de pulsos electromagnéticos mucho más cortos ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$ a $\sim 100 \text{ fs}$) que los tiempos de relajación típicos en sistemas de materia condensada. Esto ha permitido no solo el desarrollo de nuevas espectroscopías con alta resolución temporal sino también la posibilidad de modificar las propiedades cuánticas de los materiales. En particular, el control preciso de pulsos electromagnéticos ultracortos con frecuencias que van desde el visible hasta el THz ha permitido excitar selectivamente distintos modos colectivos en el sólido que inducen, de modo transitorio, nuevas fases de la materia que no están presentes en condiciones de equilibrio. La posibilidad de inducir superconductividad con luz en cupratos [9, 14] o fullerenos [15], la generación de ondas de densidad de carga después de aplicar un pulso de luz ultracorto [16] y la utilización de pulsos electromagnéticos en el rango de los THz que inducen ferroelectricidad en un sistema no ferroeléctrico [8], son algunos de los resultados experimentales más recientes en esta dirección.

Otra posible alternativa de control cuántico es la utilización de perturbaciones periódicas dependientes del tiempo, las cuales han vuelto a ser de gran interés en la comunidad científica por dos razones fundamentales: la disponibilidad de nuevas técnicas espectroscópicas ultrarápidas para analizar la respuesta transitoria de diversos sistemas físicos y también debido a la aparición de nuevas y exóticas propiedades cuánticas en algunos materiales en presencia de radiación [5, 17]. Algunos ejemplos relevantes son la creación de aislantes topológicos de Floquet [6, 18–20], el efecto túnel asistido por fotones [21, 22], la localización dinámica [23–25], la posibilidad de controlar el acoplamiento espín-órbita en sistemas atómicos ultrafríos [26] y más recientemente, la comprobación experimental del efecto Hall anómalo, inducido con luz, en grafeno [27]. Debemos mencionar también el creciente interés por nuevas fases de la materia que existen solamente fuera del equilibrio, tales como los cristales de tiempo [28, 29] observados recientemente en varios experimentos [30–32]. En este contexto, el concepto de ingeniería de Floquet es un tema con mucho auge en los últimos años [5, 33–35]. En este caso, en presencia de una perturbación periódica dependiente del tiempo (radiación electromagnética, excitación coherente de fonones, etcétera), la evolución y estado estacionario de un sistema cuántico están determinados, después de promediar adecuadamente en un período, por un nuevo hamiltoniano efectivo (hamiltoniano de Floquet) que en general posee distintas propiedades que el hamiltoniano estático y que depende de la radiación utilizada. La idea entonces es encontrar una perturbación periódica que modifique dicho hamiltoniano efectivo a nuestra voluntad (diseñar un nuevo hamiltoniano con las propiedades físicas que se deseen) [5]. Esto permite, en principio, inducir nuevos comportamientos del sistema que resultan muchas veces inaccesibles en un régimen de equilibrio. Si bien este tipo de estrategia ha sido estudiada teóricamente e implementada experimentalmente en sistemas atómicos ultrafríos [35, 36], su éxito en sistemas reales de materia condensada resulta ser en algunos casos dudosa, principalmente debido a la posibilidad de calentamiento que esto puede traer consigo en sistemas con muchos grados de libertad. En sistemas fuertemente interactuantes, se cree que este tipo de perturbación permite a un sistema perfectamente aislado, absorber energía indefinidamente y alcanzar un estado de temperatura infinita [37, 38]. Sin embargo, existen algunos casos en los que no sucede este tipo de comportamiento. Por ejemplo los sistemas integrables, sistemas en los cuales tiene lugar el fenómeno de localización de muchos cuerpos [37, 39, 40] o sistemas expuestos a radiación de muy alta frecuencia (mayor que todas las escalas de energía del problema estático) para los cuales la absorción de energía es exponencialmente chica (esencialmente se requieren procesos de muy alto orden para poder generar calentamiento) [33, 41]. Estos dos últimos fenómenos han sido comprobados experimentalmente en sistemas atómicos ultrafríos [36, 42–45] y representan un claro ejemplo

donde la ingeniería de Floquet puede ser factible aún en sistemas interactuantes de muchos cuerpos. En sistemas de materia condensada hay dos formas de eludir este tipo de problema: (a) el proceso de calentamiento es suficientemente lento como para observar, al menos de modo transitorio, cierto modo coherente del sistema fuera de equilibrio o (b) la energía absorbida por el material es eficientemente disipada al entorno alcanzándose así un estado estacionario fuera de equilibrio. A lo largo de este trabajo no tendremos en cuenta efectos de calentamiento suponiendo que la condición (a) es válida para los sistemas físicos que nos interesan describir. Los sistemas en los que son relevantes otros tipos de interacciones residuales que van más allá del formalismo de BCS (modelo integrable) no son objeto de la presente tesis.

Encontrar un mecanismo de control cuántico robusto y preciso en sistemas de materia condensada constituye uno de los pilares fundamentales de la llamada segunda revolución cuántica [46]. Sin embargo, pese al creciente avance en el área, el control cuántico de sistemas fuertemente interactuantes en y fuera de equilibrio representa todavía un gran desafío desde el punto de vista teórico, experimental y tecnológico. En este sentido uno de los objetivos de esta tesis es encontrar protocolos que permitan manipular el estado superconductor de determinados materiales fuera de equilibrio. En el contexto de las tecnologías cuánticas, los superconductores son particularmente de gran interés debido a dos razones fundamentales: sus fuertes no linealidades y sus tiempos de relajación y decoherencia relativamente largos, lo cual permite operar en un régimen cuántico durante un tiempo que puede alcanzar, en algunos casos, los nanosegundos (10^{-9} s) [47]. De hecho, estas características hacen posible hoy en día, el uso de superconductores en varios productos comerciales que van desde dispositivos de imágenes basados en detectores de inducción cinética hasta dispositivos de computación cuántica basados en qubits.

Los ejemplos experimentales más notables de control cuántico en el contexto de la superconductividad fuera de equilibrio son la generación de superconductividad transitoria a temperatura ambiente (un resultado aún controversial en la comunidad científica) [15] y la excitación de modos de amplitud coherentes del parámetro de orden superconductor conocidos como modos de Higgs [11, 12]. Paralelamente a la actividad experimental y a veces anterior a ella, muchos trabajos teóricos han estudiado la respuesta superconductora, en tiempo real, en presencia de una perturbación dependiente del tiempo, utilizando el hecho de que el hamiltoniano de Bardeen, Cooper y Schrieffer (BCS) es integrable [48–53]. La mayoría de los trabajos se concentran en el estudio de la respuesta superconductora ante un cambio súbito de la interacción atractiva λ cuya realización experimental está restringida esencialmente al uso de sistemas atómicos ultrafríos. El resultado más relevante de estos trabajos es la obtención de tres fases dinámicas del *gap* superconductor dependiendo de cuán grande sea el cambio instantáneo en λ [49]. Para un pequeño cambio de

la interacción atractiva, el parámetro de orden superconductor muestra oscilaciones amortiguadas conocidas como modo de Higgs, mientras que para cambios grandes, se obtiene una dinámica sobreamortiguada del *gap* superconductor si la interacción es disminuida u oscilaciones persistentes del parámetro de orden si la interacción atractiva ha sido incrementada [49, 51]. Sin embargo, en general, para describir correctamente tanto los sistemas de materia condensada como los sistemas de átomos fríos reales, es necesario introducir mecanismos de relajación que inevitablemente aparecen debido a la presencia del medio ambiente. Este es un desafío teórico que no ha sido considerado hasta el momento para el caso de superconductividad fuera de equilibrio y que será estudiado en detalle en esta tesis. En particular, se discutirá cómo se modifican las tres fases dinámicas mencionadas anteriormente considerando que el sistema se encuentra acoplado a un baño externo.

Mucho menos estudiado es el caso de superconductores en presencia de perturbaciones periódicas dependientes del tiempo, lo cual analizaremos en esta tesis más allá del régimen de respuesta lineal [54, 55] y también más allá de las habituales expansiones en potencias no lineales de la perturbación en términos de susceptibilidades [56–58].

Desde el punto de vista experimental, uno de los resultados pioneros en el campo de la superconductividad en presencia de radiación, es el aumento de la corriente crítica de un superconductor expuesto a un fuerte campo de microondas [59, 60]. Este resultado fue explicado por Eliashberg quien encontró que, en presencia de radiación, la distribución de cuasipartículas fuera de equilibrio es tal que se favorece la superconductividad a temperaturas cercanas a la temperatura crítica del superconductor. Para demostrarlo en su artículo [61], teniendo en cuenta las condiciones del experimento, considera un régimen difusivo en el cuál la relajación es la escala más rápida del problema. En este caso es correcto utilizar formalismos de cuasiequilibrio empleando, por ejemplo, las ecuaciones de Usadel [62]. Motivados por la nueva disponibilidad de modos de excitación ultra rápidos, nuestro objetivo es estudiar el problema en un régimen totalmente opuesto, en el cual la relajación es muchísimo más lenta que el período de la perturbación periódica. La idea es estudiar la respuesta transitoria del parámetro de orden superconductor y ver la posibilidad de obtener nuevos modos colectivos de oscilación en el dominio del tiempo, antes de que tengan lugar los efectos de relajación. A propósito, se discutirán en detalle, las posibles realizaciones de perturbaciones periódicas dependientes del tiempo que pueden ser implementadas tanto en sistemas de átomos fríos como en sistemas de materia condensada, teniendo en mente los capacidades tecnológicas actuales.

En esta tesis, analizaremos la respuesta superconductora en presencia de diferentes estímulos dependientes del tiempo, considerando un superconductor en el límite de BCS. La teoría BCS es la aproximación más utilizada para describir un su-

perconductor de una sola banda en el límite de acoplamiento débil y constituye uno de los modelos más exitoso de la Física de la Materia Condensada. En éste caso, estudiaremos cómo el parámetro de orden superconductor evoluciona en el tiempo después de un cambio súbito de la interacción atractiva (o de la densidad de estados) y también en presencia de perturbaciones periódicas dependientes del tiempo. A diferencia de las aproximaciones usadas en trabajos previos, analizaremos, mediante un cálculo autoconsistente, cómo el acoplamiento del sistema a un reservorio externo modifica la dinámica del parámetro de orden superconductor. Por último, identificaremos cuáles son las principales características que permiten detectar los modos colectivos de oscilación del parámetro de orden superconductor obtenidos en esta tesis, usando espectroscopías con resolución temporal. En particular, simularemos espectropías de fotoemisión resuelta en ángulo y tiempo (tr-ARPES) y microscopía de barrido túnel (STM) con resolución temporal, en presencia de mecanismos de relajación.

1.2. Estructura de la tesis

Esta tesis contiene cinco capítulos (incluyendo la Introducción). En el Capítulo 1 introducimos brevemente el modelo de BCS y el formalismo de pseudoespines de Anderson. Discutimos las tres fases dinámicas del *gap* superconductor que se obtienen al cambiar instantáneamente algún parámetro del hamiltoniano y el método del vector Lax que surge de la integrabilidad del modelo, lo cual será útil en el Capítulo 3. En el Capítulo 2, presentamos el formalismo de Keldysh para incluir de modo autoconsistente, distintos mecanismos de relajación en el sistema. En el Capítulo 3 analizamos el efecto de perturbaciones periódicas dependientes del tiempo en la dinámica del parámetro de orden superconductor, para después en el Capítulo 4 discutir los efectos de disipación que introduce la presencia de un baño térmico que da lugar a nuevas no linealidades en el sistema. También en el Capítulo 4, simulamos la respuesta tr-ARPES en presencia de disipación, introducimos brevemente el formalismo de Floquet para interpretar los resultados y analizamos cuales son las características principales de los nuevos modos colectivos de oscilación del parámetro de orden, usando microscopía de barrido túnel (STM) resuelta en tiempo.

Capítulo 2

Fases dinámicas del modelo de BCS ante perturbaciones súbitas

2.1. Modelo de BCS para la superconductividad

Uno de los modelos más exitosos en la física de la materia condensada es el desarrollado por Bardeen, Cooper y Schrieffer (modelo de BCS) para describir la superconductividad. La validez de dicha teoría ha sido demostrada experimentalmente en un sinnúmero de superconductores *convencionales*; en los que la interacción atractiva es mediada por fonones. En esta sección, haremos una breve introducción a dicho modelo, el cual será el soporte fundamental a lo largo de la presente tesis.

La teoría de BCS esta basada en el interesante hecho de que a pesar de las interacciones Coulombianas repulsivas, dos electrones en un sólido pueden experimentar una atracción mutua como resultado neto, debido a las oscilaciones de los iones positivos que conforman la red. Estos dos electrones forman un estado ligado conocido como par de Cooper. Fue Cooper quien mostró, que por débil que fuese esta interacción atractiva, el mar de Fermi se vuelve inestable y los electrones muy cerca de la superficie de Fermi pueden ganar energía formando un par de electrones con momento y espín total nulo. Este resultado fue el precursor fundamental de la teoría de BCS. Cuando un número macroscópico de estos pares de Cooper forman un estado cuántico coherente se produce una de las manifestaciones cuánticas a escala macroscópica más espectaculares de la Física; la superconductividad.

El hamiltoniano modelo que describe el apareamiento de electrones en el marco de esta teoría viene dado por

$$H_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \quad (2.1)$$

donde $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}$) es el operador de creación (destrucción) de un electrón con momento

k y espín σ , $\xi_k = \varepsilon_k - \mu$, ε_k es la energía de la partícula libre, μ es el nivel de Fermi y $\lambda_{kk'}$ es la interacción atractiva entre electrones. Usualmente este hamiltoniano es tratado en la aproximación de campo medio que consiste en aproximar el producto de dos operadores A y B como $AB \approx \langle A \rangle B + A \langle B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$. Dado que las interacciones, tenidas en cuenta en el segundo término de la Ec. (2.1), son de largo (infinito) alcance en el espacio k , la teoría de campo medio es exacta en el límite termodinámico. Entonces, tomando $A = c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger$ y $B = c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}$ el hamiltoniano Ec. (2.1) puede ser escrito, a menos de una constante, como

$$H_{\text{MF}} = \sum_{k\sigma} \xi_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \sum_k \Delta_k^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \sum_k \Delta_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \quad (2.2)$$

o en la representación de Nambu como

$$H_{\text{MF}} = \sum_k \psi_k^\dagger \mathbf{H}_k \psi_k \quad (2.3)$$

con $\psi_k = (c_{k\uparrow}, c_{-k\downarrow}^\dagger)^T$ y

$$\mathbf{H}_k = \begin{pmatrix} \xi_k & -\Delta_k \\ -\Delta_k^* & -\xi_k \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

donde

$$\Delta_k = \sum_{k'} \lambda_{kk'} \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \quad (2.5)$$

define el *gap* superconductor como veremos más adelante.

De esta forma, el hamiltoniano Ec. (2.2) es cuadrático en los operadores de creación y destrucción y por tanto diagonalizable. Para encontrar el espectro de excitaciones es útil introducir nuevos operadores fermiónicos $\gamma_{k\uparrow}$ y $\gamma_{-k\downarrow}$ a través de la transformación de Bogoliubov

$$\begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k^* & v_k \\ -v_k^* & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{k\uparrow} \\ \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \gamma_{k\uparrow} \\ \gamma_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & -v_k \\ v_k^* & u_k^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

donde los coeficientes u_k y v_k deben satisfacer la condición $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$ para garantizar la regla de anticomutación fermiónica de los nuevos operadores (Bogoliubones). Sustituyendo dicha transformación en el hamiltoniano de campo medio (Ec. 2.2)

$$H_{\text{MF}} = \sum_k \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^\dagger & c_{-k\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_k & -\Delta_k \\ -\Delta_k^* & -\xi_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow} \\ c_{-k\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

y eligiendo

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right) \quad (2.8)$$

y

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \right), \quad (2.9)$$

se obtiene que

$$H_{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \left(\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) + E_0 \quad (2.10)$$

donde

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \right) \quad (2.11)$$

es la energía del condensado y $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$ representa la energía de las excitaciones. Resulta claro entonces que la energía mínima para crear una excitación en el sistema (romper un par de Cooper) es $2|\Delta_{\mathbf{k}}|$ y de ahí que $\Delta_{\mathbf{k}}$ se denomine *gap* superconductor. Luego, el estado fundamental del problema no es otra cosa que el vacío de Bogoliubones; definido como aquel estado que satisface

$$\gamma_{\mathbf{k}\sigma} |\Psi_{\text{BCS}}\rangle = 0 \quad (2.12)$$

para todo \mathbf{k} y σ . Es fácil demostrar que dicho estado viene dado por

$$|\Psi_{\text{BCS}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad (2.13)$$

donde $|0\rangle$ representa el estado vacío de partículas. Usando el lenguaje de los Bogoliubones, la Ec. (2.5) para el *gap* superconductor puede escribirse como

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left\langle \left(u_{\mathbf{k}'}^* \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} - v_{\mathbf{k}'} \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \right) \left(u_{\mathbf{k}'}^* \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} + v_{\mathbf{k}'} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \right) \right\rangle, \\ \Delta_{\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} \left(\langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle - \langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \right). \end{aligned} \quad (2.14)$$

Dado que, en el formalismo de BCS, los estados con espín *up* son equivalentes a los de espín *down* y los Bogoliubones son fermiones que siguen la estadística de Fermi-Dirac con dispersión $E_{\mathbf{k}}$,

$$\langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle = \langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}'}} + 1} \quad (2.15)$$

y como consecuencia la ecuación del *gap* puede escribirse como

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right)$$

o

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right), \quad (2.16)$$

donde $\beta = 1/k_B T$ es un parámetro inversamente proporcional a la temperatura T . A lo largo de este trabajo, estudiaremos superconductores en los cuales el *gap* es isotrópico en el espacio recíproco (conocido como *s-wave superconductors* en inglés) y además es real. Para describir este tipo de sistemas basta considerar un modelo con una interacción atractiva $\lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \equiv \lambda$ no nula entre pares de Cooper que se encuentran en una vecindad \mathcal{W} alrededor de la superficie de Fermi con energías $|\xi_{\mathbf{k}}| \leq \hbar\omega_D$ siendo ω_D la frecuencia de Debye; típicamente mucho mayor que Δ y mucho menor que μ . En este caso, la ecuación que determina el *gap* superconductor Δ como función de la temperatura se reduce a

$$1 = \lambda \sum_{\mathbf{k}' \in \mathcal{W}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right) \quad (2.17)$$

con $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$. A lo largo de toda la tesis estudiaremos el estado superconductor a temperatura cero. En este caso $\left[\tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}'}}{2}\right)\right] \sim 1$ y pasando al límite del continuo dicha ecuación puede escribirse como

$$1 = \lambda \rho_F \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{d\varepsilon}{2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \quad (2.18)$$

donde hemos considerado que $\hbar\omega_D \ll \mu$ y por tanto es razonable suponer una densidad de estados constante ρ_F evaluada en el nivel de Fermi. Integrando dicha ecuación se obtiene que

$$\frac{1}{\lambda \rho_F} = \operatorname{arcsinh}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right). \quad (2.19)$$

En el límite $\Delta \ll \hbar\omega_D$, $\operatorname{arcsinh}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right) \sim \ln\left(\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta}\right)$ y finalmente el *gap* superconductor puede ser escrito como

$$\Delta = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{\rho_F \lambda}}. \quad (2.20)$$

2.2. Pseudoespines de Anderson y ecuación de movimiento

En esta sección presentamos una descripción del modelo de BCS en términos de pseudoespines 1/2, introducido por primera vez por P. W. Anderson [63]. Este nuevo formalismo, nos permitirá más adelante explicar de un modo claro algunos de los resultados más relevantes de la tesis.

Definamos para cada estado \mathbf{k} los operadores de pseudoespín

$$\begin{aligned} S_{\mathbf{k}}^x &= \frac{1}{2} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right), \\ S_{\mathbf{k}}^y &= \frac{1}{2i} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right), \\ S_{\mathbf{k}}^z &= \frac{1}{2} \left(1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} - c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} \right), \end{aligned} \quad (2.21)$$

y los operadores $S_{\mathbf{k}}^\pm = S_{\mathbf{k}}^x \pm iS_{\mathbf{k}}^y$ los cuales satisfacen las reglas de conmutación usual para el momento angular de espín $[S_{\mathbf{k}}^a, S_{\mathbf{k}}^b] = i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\epsilon_{abc}S_{\mathbf{k}}^c$ donde a, b y c representan las distintas componentes x, y, z y ϵ_{abc} es el tensor totalmente antisimétrico de Levi Civita. El valor de expectación del operador de pseudoespín $\langle S_{\mathbf{k}} \rangle = \langle S_{\mathbf{k}}^x \rangle \hat{i} + \langle S_{\mathbf{k}}^y \rangle \hat{j} + \langle S_{\mathbf{k}}^z \rangle \hat{k}$ en el estado fundamental BCS (Ec. (2.13)) permite visualizar dicho estado como un conjunto de pseudoespines clásicos (vectores en 3D de componentes $\langle S_{\mathbf{k}}^x \rangle, \langle S_{\mathbf{k}}^y \rangle$ y $\langle S_{\mathbf{k}}^z \rangle$) en el espacio recíproco con cierta textura o perfil. Note que si los estados $\mathbf{k} \uparrow$ y $-\mathbf{k} \downarrow$ están ocupados entonces $\langle S_{\mathbf{k}}^z \rangle = -1/2$ (espín *down*) mientras que $\langle S_{\mathbf{k}}^z \rangle = 1/2$ (espín *up*) si dichos estados están desocupados. En la fase normal $\langle S_{\mathbf{k}}^{x,y} \rangle \equiv 0$ y todos los estados por debajo (encima) del nivel de Fermi están ocupados (desocupados). En consecuencia, el estado fundamental en la fase normal (mar de Fermi) puede ser representado por una pared de domino con una discontinuidad en el nivel de Fermi como se muestra en la Figura 2.1a. Para un superconductor de *gap* real Δ los $u_{\mathbf{k}}$ y $v_{\mathbf{k}}$ de la Ec. (2.13) pueden ser tomados reales sin pérdida de generalidad y se reducen a

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \right)} \\ v_{\mathbf{k}} &= \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}} \right)}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

De esta forma, el estado fundamental puede ser representado por un conjunto de

pseudoespines en el espacio \mathbf{k} cuyas componentes vienen dadas por

$$\langle S_{\mathbf{k}}^x \rangle = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}}, \quad \langle S_{\mathbf{k}}^y \rangle = 0, \quad \langle S_{\mathbf{k}}^z \rangle = \frac{u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2}{2} = \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}}. \quad (2.23)$$

En este caso, el perfil que forman todos los $\langle S_{\mathbf{k}} \rangle$ juntos, muestra una dependencia suave alrededor del nivel de Fermi con un ancho característico determinado por el *gap* superconductor como se muestra en la Figura 2.1b.

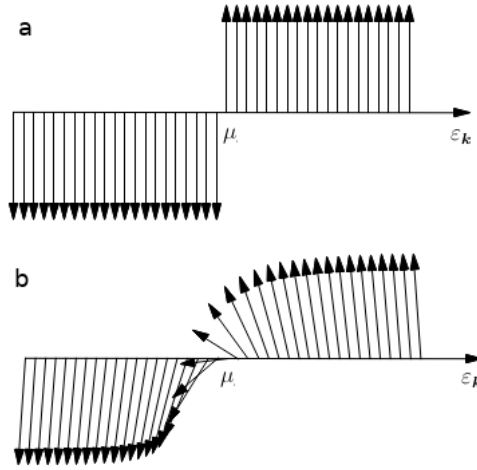


Figura 2.1: Representación del estado fundamental del sistema en la fase normal (a) y en la fase superconductora (b) a través de la textura de pseudoespín.

Usando las Ecs. (2.21), el hamiltoniano BCS dado por la Ec. (2.1) puede escribirse como

$$H_{BCS} = -2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}^z - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \lambda_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} S_{\mathbf{k}}^+ S_{\mathbf{k}'}^-, \quad (2.24)$$

el cual, en la aproximación de campo medio, se reduce a

$$H_{MF} = - \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}}. \quad (2.25)$$

Dicho hamiltoniano describe al superconductor como una colección de espines en el espacio \mathbf{k} , cada uno en presencia de un campo magnético local $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}$. En este caso, el campo magnético viene dado por $\mathbf{b}_{\mathbf{k}} = 2\Delta \hat{x} + 2\xi_{\mathbf{k}} \hat{z}$ y el *gap* superconductor puede escribirse como

$$\Delta = \lambda \sum_{\mathbf{k}} \langle S_{\mathbf{k}}^x \rangle \quad (2.26)$$

para un superconductor de onda s ($\lambda_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \equiv \lambda$) de *gap* real ($\sum_{\mathbf{k}} \langle S_{\mathbf{k}}^y \rangle = 0$). De la Ec. (2.25) resulta claro que el estado fundamental del sistema corresponde a una configuración en la que todos los pseudoespines apuntan a lo largo de su campo magnético local, lo cual minimiza la energía total. Efectivamente dicha configuración da

lugar a la distribución de pseudoespines dada por las Ecs. (2.23).

Escribamos ahora las ecuaciones de movimiento para los pseudoespines. Teniendo en cuenta la evolución del operador de pseudospin S_k^a en la representación de Heisenberg

$$i\partial_t S_k^a = [S_k^a, H_{MF}] \quad (2.27)$$

con $a = x, y, z$, y las reglas de conmutación que satisfacen dichos pseudoespines, es fácil mostrar que las ecuaciones de movimiento para los valores de expectación de los pseudoespines, pueden escribirse de forma compacta como

$$\frac{d\langle \mathbf{S}_k \rangle}{dt} = -\mathbf{b}_k \times \langle \mathbf{S}_k \rangle. \quad (2.28)$$

La Ec. (2.28) describe la precesión de un pseudospin clásico $\langle \mathbf{S}_k \rangle = \langle S_k^x \rangle \hat{x} + \langle S_k^y \rangle \hat{y} + \langle S_k^z \rangle \hat{z}$ alrededor de un campo magnético estático \mathbf{b}_k en total analogía con las ecuaciones de Bloch para espines usuales. Es importante hacer notar que la principal diferencia con este tipo de problema, es que el campo magnético $\mathbf{b}_k = 2\Delta\hat{x} + 2\xi_k\hat{z}$ depende a su vez de los pseudoespines a través de la ecuación del *gap* Δ (ver Ec. (2.26)) lo cual determina la autoconsistencia del problema superconductor.

En lo que sigue vamos a considerar solamente superconductores de *gap* isotrópico en el espacio recíproco con lo cual el problema se convierte en un problema unidimensional donde el número cuántico k puede ser reemplazado por ξ_k . A lo largo de esta tesis, estudiaremos la dinámica de $N \sim 2 \cdot 10^4$ pseudoespines $\langle \mathbf{S}_k \rangle$ cuyas ξ_k se encuentran dentro de una banda de ancho $2\omega_D = 40\Delta$ tal que $|\xi_k| \leq \omega_D$. Todos estos pseudoespines clásicos están acoplados entre sí a través de la ecuación del *gap* Ec. (2.26) por lo que el problema matemático a resolver es un sistema de N ecuaciones diferenciales acopladas entre sí. Para integrar las N ecuaciones de movimiento [Ecs. (2.28)], usamos el método de Runge-Kutta de cuarto orden con un paso de tiempo dt suficientemente chico que garantiza que el error en la evolución del parámetro de orden $\Delta(t)$ es menor a 10^{-6} . El parámetro de orden se calcula en cada paso de tiempo t y es reinsertado nuevamente en la ecuación de movimiento para determinar el *gap* en el próximo paso de tiempo $t + dt$.

2.3. Cambio súbito de la interacción atractiva

Una de las formas más simples de modelar la respuesta de un sistema físico debido a la acción de una perturbación externa localizada en el tiempo es considerar un cambio súbito de algún parámetro del hamiltoniano que describe al sistema en cuestión. Este tipo de análisis en ocasiones logra explicar satisfactoriamente comportamientos del sistema fuera de equilibrio producidos por un pulso de luz muy

corto que modifica repentinamente alguna propiedad del sistema. El estudio de los posibles modos colectivos que aparecen al cambiar de modo abrupto algún parámetro del hamiltoniano ha sido de interés en el campo de la física de la materia condensada y en sistemas atómicos ultrafríos. En particular, con átomos fríos es posible estudiar este tipo de protocolos desde el punto de vista experimental gracias al enorme avance tecnológico de los últimos años que permite simular cambios súbitos en hamiltonianos de interés con extremada precisión.

En el campo de la superconductividad, analizar la respuesta del sistema ante un cambio súbito de la interacción atractiva λ ha sido uno de los problemas más estudiados en los últimos años. Uno de los resultados más importantes es que dependiendo de cuán grande sea el cambio en la interacción atractiva, el *gap* superconductor muestra tres fases dinámicas bien marcadas. Si el cambio es suficientemente chico (tanto si aumentamos o disminuimos λ), la amplitud del *gap* superconductor muestra oscilaciones amortiguadas con una frecuencia igual a dos veces el *gap* superconductor promedio a tiempos largos, lo cual se conoce en la literatura como modo de Higgs. Por otro lado, si el cambio en λ es suficientemente grande, existen dos fases dinámicas posibles. Si λ aumenta considerablemente, el *gap* muestra oscilaciones persistentes durante un tiempo infinitamente largo (el parámetro de orden no se amortigua) lo cual corresponde a una sincronización de todos los pseudoespines del sistema. En cambio, si λ disminuye considerablemente, se observa una dinámica sobreamortiguada en la que el *gap* decrece exponencialmente a cero en el tiempo sin mostrar oscilaciones. En este capítulo estudiamos en detalle estas tres fases dinámicas, los cuales servirán como punto de partida para analizar los principales resultados de la presente tesis.

Supongamos que a $t < 0$ el superconductor se encuentra en su estado fundamental con una distribución de pseudoespines dada por la Ec. (2.23) (Fig. 2.1 b) y a $t = 0$ la constante de interacción λ cambia de λ_0 a λ_f : $\lambda(t) = \Theta(-t)\lambda_0 + \Theta(t)\lambda_f$ donde $\Theta(t)$ es la función escalón unitario de Heaviside. Dicha perturbación saca al sistema del equilibrio. Como consecuencia, los pseudoespines evolucionan en el tiempo siguiendo la ecuación de movimiento Ec. (2.28) y a su vez cambia el parámetro de orden superconductor según $\Delta(t) = \lambda(t) \sum_{\mathbf{k}} \langle S_{\mathbf{k}}^x \rangle(t)$. En lo que sigue, por simplicidad, cuantificamos el cambio de la interacción atractiva $\lambda_0 \rightarrow \lambda_f$ a través del cociente Δ_0/Δ_f , donde $\Delta_0 = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{\rho_F\lambda_0}}$ y $\Delta_f = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{\rho_F\lambda_f}}$ son los valores del *gap* BCS en equilibrio para λ_0 y λ_f respectivamente; dados por la Ec. (2.20).

La Figura 2.2 muestra la dinámica del *gap* superconductor (panel superior) y la dinámica de $\langle S_{\mathbf{k}}^x \rangle(t)$ (panel inferior) para valores de $\xi_{\mathbf{k}}$ cerca del nivel de Fermi, para tres valores distintos de Δ_0/Δ_f los cuales dan lugar a las tres fases dinámicas antes mencionadas. En la Fig. 2.2a el parámetro de orden disminuye en promedio y tiende asintóticamente a un valor Δ_{∞} mostrando oscilaciones que se van amortiguando

en el tiempo. En este caso, $\Delta(t)$ oscila con frecuencia $2\Delta_\infty$ (modo de Higgs) y se amortigua en el tiempo según la ley de potencia $t^{-1/2}$. Explícitamente, la dinámica viene dada por [49, 51, 64]

$$\Delta(t) = \Delta_\infty \left[1 + a \frac{\cos(2\Delta_\infty t + \phi)}{\sqrt{\Delta_\infty t}} \right] \quad (2.29)$$

donde a y ϕ son parámetros que dependen de la condición inicial. En lo que si-

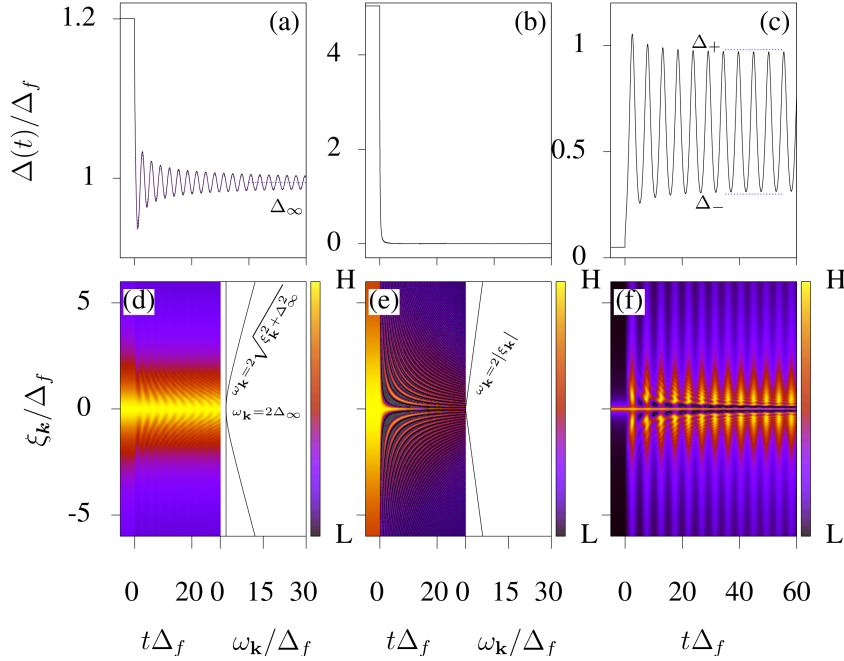


Figura 2.2: En el panel superior se muestra la dinámica del *gap* superconductor para $\Delta_0/\Delta_f = 1.2$ (a), $\Delta_0/\Delta_f = 5$ (b) y $\Delta_0/\Delta_f = 0.05$ (c). En el panel (a) también se ha graficado la Ec. (2.29) para $\Delta_\infty = 0.9943\Delta_f$, $a\Delta_\infty = 0.065\Delta_f$ y $\phi = 0.82$ la cual coincide perfectamente con el resultado numérico a tal punto que resulta imperceptible la diferencia. En el panel inferior se muestra la dinámica de la componente x del pseudospín ($\langle S_k^x \rangle$) como función del tiempo así como sus frecuencias características de oscilación obtenidas mediante un análisis de Fourier. Para la fase I los pseudospines oscilan con frecuencias $\omega_k = 2(\xi_k^2 + \Delta_\infty^2)^{1/2}$ y $\omega_k = 2\Delta_\infty$ (d) mientras que en la fase II las frecuencias de oscilación vienen dadas por $\omega_k = 2|\xi_k|$ (e). En la fase III se observa una sincronización de todos los pseudospines del sistema (f), lo cual da lugar a oscilaciones persistentes no armónicas del *gap* superconductor.

gue, llamaremos a esta fase dinámica; fase I. Nótese que en general, Δ_∞ es menor que Δ_f ; el *gap* superconductor de equilibrio correspondiente al nuevo parámetro del problema (λ_f). Para $t > 0$ el hamiltoniano es independiente del tiempo y consecuentemente, si el sistema es aislado, la energía se conserva. El estado del sistema para $t = 0^+$ no es el estado fundamental del sistema con λ_f , es una superposición de estados excitados. Si bien a tiempos largos el sistema puede evolucionar a un estado estacionario con energía E_f , esta será mayor que la energía del estado fundamental del nuevo hamiltoniano (hemos inyectado energía a $t = 0$) y por lo tanto es de esperar que Δ_∞ sea menor que Δ_f . Como veremos en el capítulo siguiente, en presencia de un baño térmico que permite el intercambio de energía, el siste-

ma evoluciona siempre hacia el estado fundamental del nuevo hamiltoniano cuya interacción atractiva es λ_f .

Como se puede ver en la Fig. 2.2a, teniendo cuenta que $\Delta_\infty = 0.9943\Delta_f$ y tomando $a\Delta_\infty = 0.065\Delta_f$, $\phi = 0.82$ la Ec. (2.29) reproduce perfectamente el resultado numérico a tiempos largos. Este modo de oscilación descrito por la Ec. (2.29) fue obtenido por primera vez por A. F. Volkov y colaboradores [64] y puede ser justificado analíticamente teniendo en cuenta un cambio infinitesimalmente pequeño en la interacción atractiva, con lo cual las ecuaciones de movimiento para los pseudoespines pueden ser linealizadas. En este caso, el amortiguamiento de las oscilaciones del *gap* viene dado por el desfase que se produce entre los distintos pseudoespines una vez perturbado el sistema. Transformando Fourier la dinámica $\langle S_k^x \rangle(t)$ para distintos valores de ξ_k , uno obtiene que además de la frecuencia fundamental $2\Delta_\infty$, los pseudoespines oscilan con un continuo de frecuencias dadas por $\omega_k = 2(\xi_k^2 + \Delta_\infty^2)^{1/2}$ (ver Fig. 2.2d) lo cual corresponde a una frecuencia de precesión (frecuencia de Larmor) a lo largo de un campo magnético efectivo independiente del tiempo $\mathbf{b}_k = 2\Delta_\infty \hat{x} + 2\xi_k \hat{z}$. Es decir, a tiempos muy largos ($t \rightarrow \infty$), cada pseudoespín precesa en su propio campo magnético independiente del resto. Este desfase es el origen del amortiguamiento en las oscilaciones del *gap*.

Para $\Delta_0/\Delta_f = 5$ (Fig. 2.2b), se obtiene una fase dinámica (fase II) en la cual el *gap* superconductor va a cero exponencialmente sin mostrar oscilaciones ($\Delta_\infty = 0$). Esta fase se puede entender pensando en límite en el cual anulamos la posibilidad de apareamiento entre electrones ($\lambda_f = 0$). En este caso, los pseudoespines están desacoplados (los pseudoespines no interactúan entre sí) y pueden oscilar libres e independientemente unos de los otros con una frecuencia propia $\omega_k = 2|\xi_k|$ (Fig. 2.2e). Este hecho da lugar a un desfase total entre los pseudoespines y un *gap* nulo a tiempos largos como resultado.

Muy distinto de lo que ocurre en las fases I y II, cuando el aumento de la interacción atractiva es suficientemente grande (por ejemplo para $\Delta_0/\Delta_f = 0.05$), se produce una sincronización entre los pseudoespines del sistema y el parámetro de orden muestra oscilaciones que persisten en el tiempo aún para $t \rightarrow \infty$ las cuales están acotadas entre los valores extremos Δ_+ y Δ_- como se ha indicado en Fig. 2.2c. Nótese como a diferencia de lo que ocurre en las Fig. 2.2d y Fig. 2.2e en este caso los pseudoespines se sincronizan, lo cual puede ser identificado con el patrón de franjas verticales que se ve en la Fig. 2.2f. A esta fase sincrónica la denotaremos en lo que sigue como fase III.

A modo de resumen, en la Figura 2.3 mostramos los valores de Δ_∞ (en la fase I y II) y de Δ_\pm (en la fase III) como función de Δ_0/Δ_f . En la figura se observa que las transiciones entre una y otra fase ocurren para $\Delta_0^{I,II} = 0.21\Delta_f$ y $\Delta_0^{II,III} = 4.81\Delta_f$ aproximadamente y que para todo Δ_0/Δ_f en la fase I $\Delta_\infty < \Delta_f$ como hemos discu-

tido anteriormente.

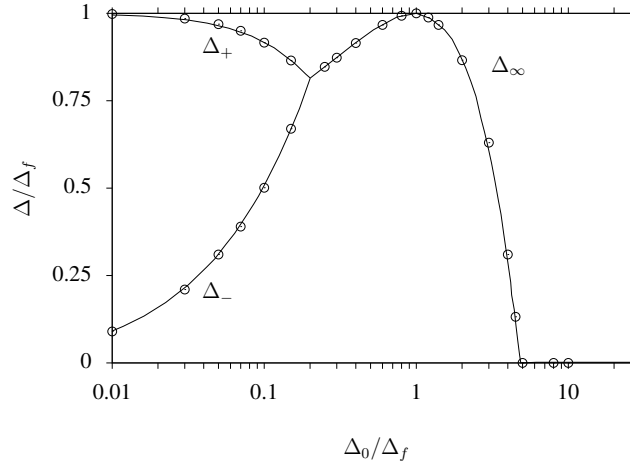


Figura 2.3: Diagrama de fases para un cambio súbito en la interacción atractiva. Los pequeños círculos corresponden a los resultados extraídos de la simulación numérica mientras que las líneas continuas corresponden a los resultados analíticos obtenidos a través del método de Lax (ver la siguiente sección).

Si bien la fase I puede ser descripta usando respuesta lineal, las fases II y III son accesibles para cambios súbitos grandes de la constante de interacción lo cual nos conduce a un régimen no lineal. No obstante, como veremos en la sección siguiente estas fases también admiten, en principio, solución analítica gracias a la integrabilidad del hamiltoniano BCS.

2.4. Integrabilidad del hamiltoniano BCS: vector Lax

A continuación mostramos como las tres fases dinámicas antes descritas pueden ser obtenidas analíticamente (sin recurrir a la solución numérica de la ecuación de movimiento de la sección anterior) teniendo en cuenta la integrabilidad del hamiltoniano BCS. Las integrales de movimiento asociadas a dicho hamiltoniano fueron encontradas por primera vez fuera del ámbito de la materia condensada en modelos del núcleo atómico en Física nuclear.

Como hemos mencionado anteriormente la dinámica del *gap* puede ser obtenida a través de la dinámica de espines clásicos (vectores en 3D). De hecho, uno puede demostrar que las ecuaciones de movimiento Ec. (2.28) son las ecuaciones de movimiento asociadas a un hamiltoniano de espines *clásicos* $s_k \equiv \langle S_k \rangle$ dado por

$$\mathcal{H}_{BCS} = -2 \sum_k \xi_k s_k^z - \lambda \sum_{k,k'} s_k^+ \cdot s_{k'}^- \quad (2.30)$$

donde $s_k^\pm \equiv \langle S_k^\pm \rangle$. Esto significa que las Ecs. (2.28) no son otra cosa que las ecuaciones de Hamilton $\partial_t s_k = \{\mathcal{H}_{BCS}, s_k\}$ derivadas de la Ec. (2.30) usando los corchetes

de Poisson usuales para el momento angular $\{s_{\mathbf{k}}^a, s_{\mathbf{k}'}^b\} = -\varepsilon_{abc}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}s_{\mathbf{k}}^c$ donde a, b y c corresponden a las componentes x, y, z respectivamente y ε_{abc} es el tensor de Levi Civita. De esta forma, el modelo clásico descrito por el hamiltoniano (2.30) puede ser obtenido de su contraparte cuántica cambiando los operadores de espín por variables clásicas y el conmutador por los corchetes de Poisson. Para mostrar la integrabilidad del modelo (tanto en su versión clásica como cuántica) uno puede hacer uso de un método espectral conocido como método de Lax [50, 51] lo cual esbozamos a continuación. Para ello, introduzcamos el vector Lax definido como,

$$\mathbf{L}(u) = \mathbf{z} + \lambda \sum_{\mathbf{k}} \frac{\mathbf{s}_{\mathbf{k}}}{u - \xi_{\mathbf{k}}}. \quad (2.31)$$

donde u es un parámetro auxiliar que define el espectro de frecuencias relevantes del problema. Usando las reglas de los corchetes de Poisson, cualquiera sea el valor del parámetro u , las componentes de este vector satisfacen que

$$\{L^a(v), L^b(w)\} = \varepsilon_{abc} \frac{L^c(v) - L^c(w)}{v - w} \quad (2.32)$$

(y permutaciones cíclicas) lo cual permite demostrar que

$$\{\mathbf{L}^2(v), \mathbf{L}^2(w)\} = 0. \quad (2.33)$$

Por otro lado, el vector Lax al cuadrado puede escribirse explícitamente como

$$\mathbf{L}^2(u) = 1 + \lambda^2 \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{2H_{\mathbf{k}}(u)}{u - \xi_{\mathbf{k}}} + \frac{\mathbf{s}_{\mathbf{k}}^2}{(u - \xi_{\mathbf{k}})^2} \right) \quad (2.34)$$

donde

$$H_{\mathbf{k}}(u) = \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\mathbf{s}_{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{k}'}}{u - \xi_{\mathbf{k}'}} + \frac{s_{\mathbf{k}}^z}{\lambda}. \quad (2.35)$$

Dado que los vectores Lax al cuadrado conmutan entre sí para cualquiera sea v y w , de la Ec. (2.34) resulta entonces que todos los $H_{\mathbf{k}}$ conmutan entre sí y por tanto cada uno de ellos define un modelo clásico integrable siendo los $H_{\mathbf{k}}$ las N integrales de movimiento (incluyéndose a sí mismo), donde N es el número de valores \mathbf{k} (o valores $\xi_{\mathbf{k}}$ para el caso de *s-waves superconductors*) que se considere. Dicho esto, solo resta ver que el hamiltoniano BCS puede ser escrito como

$$\mathcal{H}_{BCS} = -2\lambda \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}}(\xi_{\mathbf{k}}) + cte, \quad (2.36)$$

con lo cual queda claro que también \mathcal{H}_{BCS} conmuta con todos los $H_{\mathbf{k}}$ y por tanto es integrable. Volviendo hacia atrás, cuantizando el hamiltoniano, es posible ver que

H_{BCS} (con los operadores de espín) es integrable de la misma manera. Si bien las integrales de movimiento vienen dadas por los H_k es $L^2(u)$ quien posee la información más importante como discutimos a continuación. El $L^2(u)$ es una cantidad que se conserva durante la evolución temporal y por tanto sus raíces (en lo que sigue raíces Lax) también son cantidades conservadas que contienen la información relevante de la dinámica a tiempos largos. Debido a que el vector Lax al cuadrado es siempre positivo entonces todas sus raíces aparecen en pares complejos conjugados. Por otro lado, dado que $s_k^x = s_{-k}^x$ y $s_k^z = -s_{-k}^z$ para todo tiempo, donde k y $-k$ denotan el estado de cuasipartícula con energía ξ_k y $\xi_{-k} = -\xi_k$, respectivamente, es fácil darse cuenta que si u es una raíz Lax $-u$ también lo es. La utilidad de este vector radica en el hecho de que la dinámica del parámetro de orden está relacionada con el número de pares aislados de raíces Lax m [50, 51]. De hecho, $\Delta(t)$ presenta oscilaciones persistentes a tiempo largos si $m > 1$ (más de un par de raíces Lax aisladas) mientras que $\Delta(t) \rightarrow \Delta_\infty$ (oscilaciones amortiguadas) si $m = 1$. Además, el número de frecuencias que aparecen en la fase III viene dado por la parte entera de $m/2$. Dado que $L^2(u)$ es una cantidad conservada podemos evaluarla en la condición inicial para los distintos valores de λ y con ello obtener el comportamiento del sistema a tiempo largos sin necesidad de realizar el cálculo numérico de la sección anterior. Al evaluar $L^2(u)$ para el estado inicial Ec. (2.23) uno puede ver que existe un continuo de raíces reales y que las raíces Lax aisladas que aparecen son imaginarias puras. Sustituyendo Ec. (2.23) en la ecuación (2.31) se obtiene que

$$L(u) = \lambda \Delta \sum_k \frac{1}{2(u - \xi_k) \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \hat{x} + \left(1 + \lambda \sum_k \frac{\xi_k}{2(u - \xi_k) \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}} \right) \hat{z}. \quad (2.37)$$

En equilibrio, para $\lambda = \lambda_0$ y usando la ecuación del *gap*

$$1 = \lambda_0 \sum_k \frac{1}{2\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_0^2}} \quad (2.38)$$

el vector Lax puede escribirse como

$$L(u) = (\Delta_0 \hat{x} + u \hat{z}) L_s(u),$$

donde

$$L_s(u) = \lambda_0 \sum_k \frac{1}{2(u - \xi_k) \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_0^2}}. \quad (2.39)$$

De aquí resulta claro que para $u \rightarrow \xi_k \pm 0$, $L_s(u) \rightarrow \pm\infty$ y por tanto $L^2(u) = (\Delta_0^2 + u^2) L_s^2(u)$ tiene raíces reales entre los distintos ξ_k , lo cual en el límite del continuo da lugar a una línea de raíces Lax sobre el eje real. Además de este continuo

de raíces, aparece también el par de raíces aisladas $u = \pm i\Delta_0$ que brinda justamente información sobre el *gap* superconductor en dicho régimen de equilibrio (Δ_0). Para λ_f distinto del valor de equilibrio, las raíces Lax se modifican de acuerdo con la Ec. (2.37) (por ejemplo no podemos emplear la Ec. (2.38) en Ec. (2.37) para obtener la Ec. (2.39) y existen, como consecuencia, tres posibles escenarios. Una primera posibilidad es que $L^2(u)$ tenga 1 par de raíces complejas conjugadas. En este caso, las raíces Lax vienen dadas por $\pm i\Delta_\infty$ definiendo así unívocamente el valor del *gap* asintótico Δ_∞ y correspondiendo por ende a la fase I. Otra posibilidad es que no exista ninguna raíz aislada (solo el continuo en el eje real) lo cual corresponde al colapso de las dos raíces $\pm i\Delta_\infty$ en el origen de coordenadas correspondiendo así a la fase II en la que $\Delta_\infty = 0$. Por último el $L^2(u)$ puede tener dos pares de raíces complejas conjugadas aisladas $\pm iu_1$ y $\pm iu_2$ que definen los valores extremos $\Delta_\pm = (u_1 \pm u_2) \Delta_f$ de la fase dinámica III cuya solución analítica puede ser expresada en términos de funciones elípticas de Jacobi. La Figura 2.4 muestra los ceros del $L^2(u)$ en el plano complejo para los mismos valores de Δ_0/Δ_f usados en la Figura 2.2.

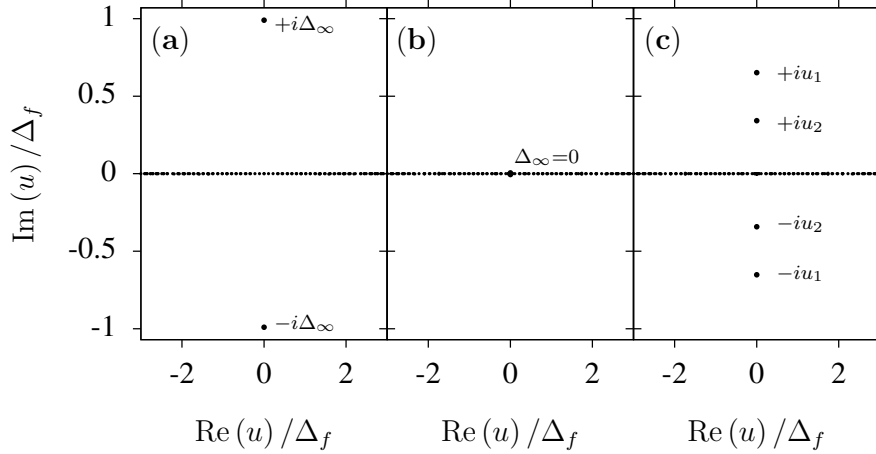


Figura 2.4: Ceros del $L^2(u)$ en el plano complejo para $\Delta_0/\Delta_f = 1.2$ (a), $\Delta_0/\Delta_f = 5$ (b), $\Delta_0/\Delta_f = 0.05$ (c) correspondiendo a las fases I, II y III respectivamente.

Puede verse como los valores obtenidos para Δ_∞ y Δ_\pm a través de este método de Lax están en perfecto acuerdo con los resultados numéricos obtenidos en la sección anterior. En el panel (a) de la Fig. 2.4 las raíces aisladas son imaginarias puras y vienen dadas por el par $\pm i0.9943\Delta_f$ lo cual se corresponde con el valor de $\Delta_\infty = 0.9943\Delta_f$ que se obtuvo en la simulación numérica anterior (ver Fig. 2.2a). En el panel (b) no existen raíces Lax aisladas ($\Delta_\infty = 0$) lo cual está de acuerdo con la dinámica de la Fig. 2.2b. Por otro lado, del panel (c) de la Fig. 2.4 uno puede deducir los valores $\Delta_+ = 0.97\Delta_f$ y $\Delta_- = 0.31\Delta_f$ que están en pleno acuerdo con la simulaciones de la Fig. 2.2c. Este procedimiento de hallar ceros del vector Lax los hemos hecho para cambios en la interacción atractiva en el rango $0.01 \leq \Delta_0/\Delta_f \leq 10$ lo cual da lugar a los Δ_∞ y Δ_\pm representados con líneas continuas en la Figura 2.3.

Capítulo 3

Respuesta dinámica del superconductor acoplado a un baño térmico

El significativo avance experimental en el campo de las espectroscopías con resolución temporal, ha permitido excitar y detectar nuevos modos colectivos y fases dinámicas en materiales cuánticos fuera de equilibrio que no tienen contraparte o resultan inaccesibles en condiciones de equilibrio [9, 15, 65]. Un ejemplo relevante es la observación experimental de oscilaciones del parámetro de orden superconductor después de excitar al sistema con un pulso de luz ultracorto en el rango de los THz. En estos experimentos, existe un estado transitorio en el cual la frecuencia de dichas oscilaciones es proporcional al *gap* y se corresponde muy bien, en términos generales, con la fase I (modo de Higgs) [11, 12, 66] obtenida en el capítulo anterior al considerar un superconductor BCS perfectamente aislado. Sin embargo, en los sistemas físicos reales, es inevitable el acoplamiento del sistema a su medio ambiente, la presencia de interacciones residuales, impurezas magnéticas u otros mecanismos que rompen pares de Cooper y afectan notoriamente el estado superconductor. En este capítulo incluiremos mecanismos de relajación en la dinámica del superconductor debido a su interacción con un baño térmico. A lo largo de este capítulo y de toda la tesis usaremos el término *disipación* para referirnos a los efectos de relajación de energía que introduce el acoplamiento del sistema a un reservorio externo.

El problema de sistemas interactuantes fuera de equilibrio, representa un gran desafío en la física de la materia condensada actual. Desde el punto de vista teórico, el problema requiere la implementación precisa de ecuaciones de movimiento que son derivadas de la teoría de campos cuántica de Baym-Kadanoff-Keldysh para problemas de muchos cuerpos fuera de equilibrio [67, 68], una estrategia que aunque está rigurosamente bien formulada es muchas veces difícil de tratar compu-

tacionalmente. No obstante, algunos casos particulares han sido estudiados con un buen grado de precisión [69, 70]. Las expansiones diagramáticas y teorías de campo medio dinámico (DMFT) para fermiones en modelos de red, son algunas de las aproximaciones más usadas para tratar este tipo de problemas [71–77]. En este capítulo, emplearemos el formalismo de Keldysh para introducir perturbativamente mecanismos de relajación en el problema del superconductor BCS fuera de equilibrio.

Por otro lado, los sistemas atómicos ultrafríos son ideales para la simulación de fenómenos de materia condensada con un altísimo grado de precisión y en condiciones muy bien controladas. En particular, la superconductividad fuera de equilibrio en condensados fermiónicos de átomos ultrafríos ha sido objeto de estudio teórico de varios grupos durante los últimos años [48, 49, 52, 78–80]. En la mayoría de los casos se estudia la respuesta superconductora cuando algún parámetro que caracteriza al hamiltoniano del sistema es modificado en cierto instante de tiempo. Notablemente, en todos estos trabajos teóricos, se consideran superconductores BCS perfectamente aislados en los cuales la integrabilidad del hamiltoniano permite describir la dinámica del *gap* superconductor a tiempos largos de manera exacta en términos del $L^2(u)$ como hemos discutido en el capítulo anterior. Sin embargo, tanto en sistemas atómicos ultrafríos como en materia condensada, los efectos del medio ambiente son inevitables y en muchos casos sus contribuciones pueden ser determinantes. En general, para obtener un buen acuerdo entre teoría y experimento uno debe hacer un estudio más profundo del problema e incluir la interacción del sistema con su entorno, efectos de impurezas o interacciones residuales. Estos factores rompen la integrabilidad del problema y por ende uno necesita integrar las ecuaciones de movimiento numéricamente para encontrar la respuesta dinámica del superconductor. En este sentido, una pregunta que surge naturalmente es si será posible observar cada una de las *tres* fases dinámicas en experimentos reales donde este tipo de factores están presentes.

Por un lado, la integrabilidad del modelo BCS implica que el sistema fuera de equilibrio no puede alcanzar el equilibrio térmico ni siquiera para $t \rightarrow \infty$ (la dinámica del sistema se encuentra atrapada en una región acotada del espacio de fase). Por otro lado, los sistemas físicos reales por supuesto son expuestos a mecanismos de relajación y si la relajación es suficientemente rápida las oscilaciones con frecuencia $2\Delta_\infty$ podrían no ser apreciadas. Afortunadamente, varios experimentos realizados en cupratos [66] y en $\text{Nb}_{1-x}\text{Ti}_x\text{N}$ [11, 12] logran medir oscilaciones del *gap* superconductor con frecuencia $2\Delta_\infty$ usando espectroscopía Raman impulsiva y técnicas de *pump-probe* en el rango de los THz. Esto se debe a que los tiempos de relajación en estos sistemas (cualquiera sean los mecanismos involucrados) resultan ser suficientemente largos como para tener acceso a un régimen transitorio donde el sistema

absorbe energía y la retiene por un corto período de tiempo sin que sea disipada a su entorno. No obstante, aún en estos sistemas muy bien aislados, es interesante entender y describir correctamente, desde el punto de vista teórico, cómo el sistema pasa de una dinámica transitoria a un estado de equilibrio térmico. Un primer paso en esta dirección es considerar un baño térmico el cual puede intercambiar energía con el superconductor. La formulación teórica de dicho problema de muchos cuerpos fuera de equilibrio y en presencia de disipación representa un problema altamente demandante. De hecho, considerar explícitamente todos los grados de libertad de un baño real desde el punto de vista microscópico es un problema numéricamente complicado que ha sido estudiado solo para algunos sistemas particulares en equilibrio, empleando técnicas basadas en el grupo de renormalización numérica [81, 82]. Por otro lado, para un baño térmico finito, suelen aparecer oscilaciones espurias en la dinámica, lo cual impide muchas veces explicar los resultados experimentales correctamente.

Recientemente, en el contexto de superconductores fuera de equilibrio se han propuestos algunos tratamientos alternativos que permiten estudiar el problema de termalización de una manera simple y computacionalmente factible. Estudios teóricos recientes, sobre espectroscopías de fotoemisión resuelta en ángulo y en tiempo (trARPES) [83] y de conductividad óptica [84], incluyen en su formulación procesos inelásticos que permiten liberar la energía extra del sistema al baño logrando así alcanzar un equilibrio térmico. Sin embargo, ninguno de estos trabajos calcula la dinámica del parámetro de orden superconductor de modo autoconsistente en presencia de dichos procesos dispersivos. De hecho, se limitan a la simulación de las espectroscopías suponiendo conocido el parámetro de orden superconductor como función del tiempo (la evolución temporal del *gap* superconductor es un dato del problema). En este capítulo presentaremos un nuevo formalismo que permite calcular de modo *autoconsistente* la evolución del parámetro de orden en presencia de mecanismos de relajación que surgen debido al acoplamiento del sistema a un baño externo. Dicho formalismo será empleado primero para analizar cómo se modifican las tres fases dinámicas descritas en el capítulo anterior en presencia de disipación y posteriormente, en el capítulo 5, en el estudio de perturbaciones periódicas en superconductores en materia condensada. Lo que se observa en el caso de las perturbaciones súbitas es que la dinámica a tiempos cortos muestra similitud con las fases I, II y III según sea el cambio en la interacción atractiva mientras que a tiempos largos el sistema tiende al estado fundamental del hamiltoniano con la nueva interacción atractiva.

3.1. Formalismo de Keldysh para incluir relajación de energía en presencia de un baño térmico

En esta sección, incluimos efectos de disipación en el superconductor usando el formalismo de Keldysh para funciones de Green fuera de equilibrio y estudiamos cómo los nuevos mecanismos de relajación introducidos modifican las tres fases dinámicas discutidas en el capítulo anterior.

El cambio en la interacción atractiva $\lambda(t)$ que hemos estado analizando, implica una inyección de energía en el sistema la cual no puede ser disipada teniendo en cuenta un superconductor BCS perfectamente aislado. Para describir los efectos de intercambio de energía, suponemos que el sistema se acopla a un reservorio externo. Para tratar este tipo de problema dejaremos de lado, por el momento, el formalismo de pseudoespines de Anderson e introducimos el formalismo de Keldysh, el cual permite considerar, en principio, distintos mecanismos de relajación desde el punto de vista microscópico. En este caso, la solución autoconsistente del *gap* superconductor se obtiene en términos de las funciones de Green en el contorno de Keldysh las cuales contienen explícitamente el acoplamiento con el baño.

3.1.1. Funciones de Green fuera de equilibrio

El cálculo autoconsistente del *gap* superconductor es formulado en términos de las funciones de Green en el contorno de Keldysh, las cuales en la base de espinores de Nambu son matrices 2×2 cuyos elementos de matriz vienen dados por:

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(t, t')_{\alpha\beta} = -i\Theta(t - t') \left\langle \left\{ \psi_{\mathbf{k}\alpha}(t), \psi_{\mathbf{k}\beta}^\dagger(t') \right\} \right\rangle, \quad (3.1)$$

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^A(t, t')_{\alpha\beta} = i\Theta(t' - t) \left\langle \left\{ \psi_{\mathbf{k}\alpha}(t), \psi_{\mathbf{k}\beta}^\dagger(t') \right\} \right\rangle, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t, t')_{\alpha\beta} = i \left\langle \psi_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger(t') \psi_{\mathbf{k}\beta}(t) \right\rangle, \quad (3.3)$$

donde el supraíndice R , A y $<$ se refiere a la función de Green retardada, avanzada y menor, respectivamente. El valor de expectación $\langle \dots \rangle$ se toma respecto del estado fundamental del sistema a temperatura cero, $\psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}^T$ y $\Theta(x)$ es la función escalón de Heaviside. Nótese que $\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^A(t, t') = \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(t', t)^\dagger$, luego solo una de las funciones $\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{A/R}$ necesita ser calculada quedando la otra unívocamente determinada. Con el uso de estas definiciones, la Ec. (2.26) para el parámetro de orden superconductor, puede ser escrita en términos de la función de Green menor para $t = t'$ y viene dada por

$$\Delta(t) = -i\lambda(t) \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t, t)_{12}. \quad (3.4)$$

Necesitamos entonces estudiar la evolución temporal de las funciones de Green que a su vez dependen de $\Delta(t)$ lo cual define la autoconsistencia del problema.

Si uno conoce la dependencia temporal del parámetro de orden superconductor $\Delta(t)$ (autoconsistente o no), la función de Green retardada para el problema en ausencia de disipación (sistema desacoplado del reservorio), en la base de Nambu y tomando $\hbar = 1$, puede ser calculada de la ecuación

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H}_k(t) \right) \mathbf{G}_k^{R(0)}(t, t') = \delta(t - t') \quad (3.5)$$

la cual puede ser escrita como

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{G}_k^{R(0)}(t, t') &= \mathbf{H}_k(t) \mathbf{G}_k^{R(0)}(t, t'), & t > t', \\ i \frac{\partial}{\partial t'} \mathbf{G}_k^{R(0)}(t, t') &= -\mathbf{G}_k^{R(0)}(t, t') \mathbf{H}_k(t'), & t > t', \end{aligned} \quad (3.6)$$

y cuya condición de contorno es

$$\mathbf{G}_k^{R(0)}(t, t) = -i\mathbf{I},$$

donde \mathbf{I} es la matriz unidad de 2×2 . En estas ecuaciones hemos usado el supra-índice 0 para indicar que dichas funciones de Green retardadas corresponden a las funciones de Green *desnudas* (funciones de Green del sistema desacoplado del baño) cuya evolución temporal está determinada exclusivamente por el hamiltoniano del sistema aislado $\mathbf{H}_k(t)$ que depende del tiempo a través de $\Delta(t)$ (ver Ec. 2.4 del capítulo anterior).

La forma en la que un reservorio externo modifica las propiedades del sistema varía dependiendo de cómo es el acoplamiento entre ambos subsistemas. Un modelo muy usado en la literatura y con amplias aplicaciones prácticas es considerar que el sistema está acoplado a un reservorio a través de una barrera túnel y que los electrones pueden pasar de un lado a otro con cierta probabilidad. En este trabajo, el acoplamiento entre ambos subsistemas será tratado *perturbativamente* en el marco de las funciones de Green, al incluir procesos en los cuales los electrones pueden ir y volver del superconductor a un reservorio externo. La contribución de estos procesos aparecen en las funciones de Green como una corrección a la energía del sistema (autoenergía) la cual es obtenida al considerar diagramas de Feynman a distintos órdenes en el acoplamiento superconductor-baño como veremos en la siguiente sección.

En la teoría de funciones de Green fuera de equilibrio, las expansiones perturbativas tienen la misma estructura que se utiliza para las funciones de Green en

equilibrio y satisfacen formalmente las mismas ecuaciones de Dyson. Para problemas fuera de equilibrio dichas ecuaciones vienen dadas por [83, 85, 86],

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(t, t') = \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{R(0)}(t, t') + \int dt_1 \int dt_2 \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{R(0)}(t, t_1) \Sigma_{\mathbf{k}}^R(t_1, t_2) \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(t_2, t'), \quad (3.7)$$

y

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t, t') = \int dt_1 \int dt_2 \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(t, t_1) \Sigma_{\mathbf{k}}^<(t_1, t_2) \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^A(t_2, t'), \quad (3.8)$$

donde $\Sigma_{\mathbf{k}}^R(t_1, t_2)$ y $\Sigma_{\mathbf{k}}^<(t_1, t_2)$ son las autoenergías del problema en las cuales está contenida toda la información referida al acoplamiento del sistema con el baño externo (nuestra perturbación). De este modo, dada una condición inicial para las funciones de Green, sus evoluciones temporales quedan determinadas por las Ecs. (3.7) y (3.8) una vez definida alguna aproximación para las autoenergías (mecanismos de relajación o interacciones que se deseen considerar). En nuestro caso, los procesos relacionados con el acoplamiento entre el superconductor y el baño que modifican la dinámica del parámetro de orden. En la siguiente sección definimos cuáles mecanismos serán considerados en este trabajo.

3.1.2. Autoenergías en el límite de banda ancha: efectos de disipación en el superconductor

Siguiendo las Refs. [83] y [84], consideraremos que el superconductor está acoplado a un baño térmico a través de una barrera túnel y los electrones pueden ir de un subsistema a otro con cierta probabilidad. Por simplicidad, el baño térmico es descrito por un hamiltoniano de partícula libre e independiente del tiempo $H_b = \sum_{\ell} E_{\ell} d_{\ell}^{\dagger} d_{\ell}$, donde d_{ℓ}^{\dagger} (d_{ℓ}) crea (destruye) un electrón en el estado $|\ell\rangle$ del reservorio, con energía E_{ℓ} . De esta forma, consideraremos que el baño se encuentra en equilibrio en todo momento y la perturbación dependiente del tiempo solo actúa en el superconductor. El tunelaje de electrones del superconductor al reservorio y viceversa es descrito por el hamiltoniano $H_T = \sum_{\mathbf{k}\ell} V_{\mathbf{k}\ell} \left(d_{\ell}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}(t) + c_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) d_{\ell} \right)$ donde la dependencia temporal de los operadores $c_{\mathbf{k}}(c_{\mathbf{k}}^{\dagger})$ justamente determina la evolución temporal de las funciones de Green asociadas al superconductor fuera de equilibrio. Los valores de los elementos de matriz de tunelaje $V_{\mathbf{k}\ell}$ dependen de la forma de los estados del reservorio $\{|\ell\rangle\}$, de las funciones de onda del estado BCS y de los detalles de cómo es el acoplamiento entre ambos subsistemas. Si consideramos el hamiltoniano H_T en teoría de perturbaciones usando el formalismo de funciones de Green, análogo a lo que sucede, por ejemplo con la interacción electrón-fonón, la corrección a la energía al orden más bajo en el acoplamiento $V_{\mathbf{k}\ell}$ viene del desarrollo a segundo orden en la perturbación. La corrección a la energía (autoenergía) en este

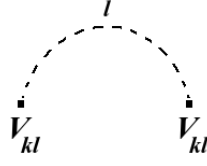


Figura 3.1: Diagrama de Feynman para la autoenergía. La línea discontinua representa la función de Green retardada asociada al hamiltoniano del reservorio y los vértices (puntos) representan el acoplamiento $V_{k\ell}$ con el superconductor.

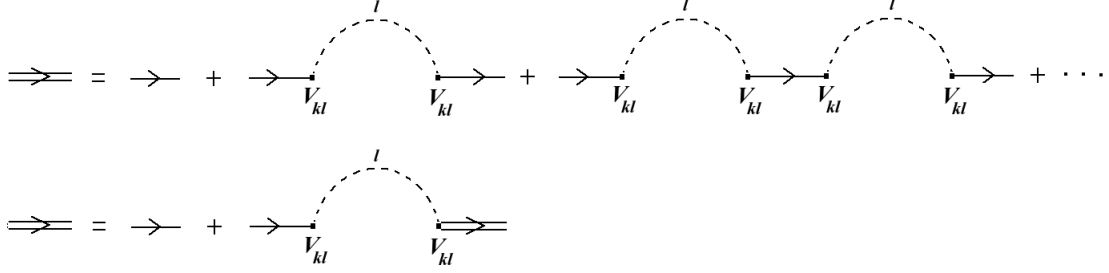


Figura 3.2: Diagrama de Feynman para la función de Green retardada dada por la Ec. (3.7). Al igual que en la Fig. 3.1, la línea punteada representa la función de Green retardada asociada al hamiltoniano del reservorio y los vértices (puntos) representan el acoplamiento $V_{k\ell}$ con el superconductor. La línea continua representa la función de Green para el superconductor aislado y la doble línea la función de Green para el superconductor acoplado al baño.

caso puede ser representada por el diagrama de Feynman de la Fig. 3.1.

Dado que H_b es independiente del tiempo, tenemos invarianza temporal en el baño, lo cual permite tratar a las funciones de Green asociadas al reservorio (y como consecuencia las autoenergías) en el dominio de las frecuencias. En la base de Nambu, H_b toma la forma $H_b = E_\ell \tau_z$ donde τ_z es la matriz de Pauli en z y como consecuencia la autoenergía retardada, a segundo orden en el acoplamiento superconductor-baño (que resulta de evaluar el diagrama de Feynman de la Fig. 3.1) puede escribirse como

$$\Sigma_{\mathbf{k}}^R(\omega) = \sum_{\ell} |V_{\mathbf{k}\ell}|^2 g_{\ell}^R(\omega) = \sum_{\ell} |V_{\mathbf{k}\ell}|^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega - E_{\ell} + i0^+} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\omega + E_{\ell} + i0^+} \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

donde $g_{\ell}^R(\omega)$ es la función de Green retardada asociada a H_b . Esta autoenergía tiene en cuenta procesos de segundo orden en el acoplamiento entre ambos subsistemas y físicamente corresponde al hecho de que el electrón puede ir al reservorio propagarse allí y luego volver al superconductor.

Por otro lado, debemos tener en cuenta que en la función de Green retardada Ec. (3.7) se tiene en cuenta la suma de todos los procesos en los cuales el electrón va y vuelve del reservorio como se representa en la Fig. 3.2.

Por simplicidad, en lo que sigue, eliminamos el subíndice \mathbf{k} suponiendo que el acoplamiento entre ambos sistemas es independiente del momento ($V_{\mathbf{k}\ell} \equiv V_{\ell}$). En este caso, estamos suponiendo que los estados \mathbf{k} que participan en el proceso de

tunelaje tienen energías muy parecidas entre sí (muy cercanas al nivel de Fermi) y por tanto todos los k se acoplan de la misma forma a los estados del reservorio. Esto podría ser una descripción adecuada para el caso de un superconductor BCS donde los electrones que participan en la superconductividad se encuentran en una pequeña banda de energía de ancho $2\omega_D$ mucho menor que el potencial químico. En última instancia, los resultados experimentales son los que dictan si dicha aproximación logra explicar satisfactoriamente o no los fenómenos físicos que se estén estudiando en el experimento en cuestión. Otro posible escenario, en el cual dicha aproximación es válida, es pensar que la barrera túnel que separa ambos subsistemas es un material aislante fuertemente desordenado con lo cual los electrones pierden información del momento k y uno puede considerar un acoplamiento efectivo promedio. No obstante, debemos señalar que extender esta formulación al caso en el que existe una dependencia en k es inmediata como veremos a continuación. En el caso que nos ocupa ahora, los elementos de matriz no nulos de la autoenergía retardada pueden ser escritos simplemente como,

$$\Sigma^R(\omega)_{11} = \sum_{\ell} \frac{|V_{\ell}|^2}{\omega - E_{\ell} + i0^+} = \Lambda(\omega) - \frac{i}{2}\gamma(\omega) \quad (3.10)$$

y $\Sigma^R(\omega)_{22} = -\Sigma^R(-\omega)_{11}^*$. Nótese que si tenemos en cuenta alguna dependencia en k basta agregar un subíndice k a ambos lados de la Ec. (3.10). Para cada k tenemos una corrección a la energía dada por $\Lambda_k(\omega)$ y una parte imaginaria $\gamma_k(\omega)$ cuyas dependencias en k vienen solamente del $V_{k\ell}$ que se considere. En nuestro caso, no estamos interesados en modelar algún $V_{k\ell}$ particular. El propósito es estudiar los efectos de relajación de energía usando el modelo más simple posible.

A lo largo de este trabajo, usaremos la aproximación de banda ancha para el reservorio, en la cual $\Lambda(\omega)$ se considera despreciable y el ensanchamiento de los niveles $\gamma(\omega) \equiv \gamma$ es considerado un parámetro independiente de la energía que define la escala de tiempo característica de los mecanismos de relajación. Estas consideraciones se basan en suponer que la densidad de estados del reservorio es prácticamente constante cerca del nivel de Fermi. Con esta última aproximación, no estamos teniendo en cuenta la posible estructura en energía que puede tener el baño térmico; por ejemplo efectos de retardo en el baño no están siendo incluidos. No obstante, la aproximación de banda ancha ha sido usada ampliamente y captura la física más importante del problema en muchos casos, logrando explicar fehacientemente experimentos de transporte donde los electrodos son metálicos, no son de baja dimensión (no son puntos cuánticos, sistemas cuasi-unidimensionales o bidimensionales como los nanotubos y el grafeno respectivamente) y donde la contribución más relevante viene dada por los estados con energías cercanas al nivel de Fermi [87–89]. De esta

forma, uno espera que para reservorios metálicos 3D, el límite de banda ancha proporcione una descripción al menos cualitativamente acertada de lo que sucede en el experimento. Bajo esta aproximación, la autoenergía retardada viene dada entonces por

$$\Sigma^R(\omega) = -i\mathbf{I}\gamma/2 \quad (3.11)$$

o en el dominio del tiempo por

$$\Sigma^R(t_1, t_2) = -\frac{i\mathbf{I}\gamma}{2} \delta(t_1 - t_2). \quad (3.12)$$

Si escribimos la ecuación de Dyson Ec. (3.7) en formal diferencial

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - \mathbf{H}_{\mathbf{k}}(t) \right) \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(t, t') = \delta(t - t') + \int dt_2 \Sigma_{\mathbf{k}}^R(t, t_2) \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(t_2, t') \quad (3.13)$$

es fácil ver que la solución para la función de Green retardada teniendo en cuenta la autoenergía Ec. (3.12) es

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(t, t') = \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{R(0)}(t, t') e^{-\gamma(t-t')/2}. \quad (3.14)$$

El efecto del acoplamiento con el baño, en esta aproximación, se traduce en un corrimiento de los polos de la función de Green retardada. Dichos polos se salen del eje real al adquirir una parte imaginaria igual a $-i\gamma/2$. El parámetro γ en este formalismo, describe efectos de dispersión inelástica que producen una vida media finita $\tau = 1/\gamma$ y un ensanchamiento de los niveles $\sim \gamma$.

Por otro lado, la autoenergía menor, a segundo orden en el acoplamiento es

$$\Sigma^<(\omega) = \sum_{\ell} |V_{\ell}|^2 g_{\ell}^<(\omega) = i\gamma f(\omega) \mathbf{I}, \quad (3.15)$$

donde $g_{\ell}^<(\omega) = if(\omega)A_{\ell}(\omega)$ es la función de Green menor asociada a H_b , $A_{\ell}(\omega)$ es la función espectral del baño y $f(\omega)$ es la función de Fermi evaluada a la temperatura del reservorio, la cual por simplicidad será considerada cero por simplicidad y por lo tanto $f(\omega) = \Theta(-\omega)$. Transformando Fourier la Ec. (3.15) se obtiene que la autoenergía menor en el dominio del tiempo puede escribirse como una matriz diagonal $\Sigma_{\mathbf{k}}^<(t_1, t_2) = \mathbf{I}\Sigma^<(t_1, t_2)$ donde

$$\Sigma^<(t_1, t_2) = i\gamma \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) e^{-i\omega(t_1-t_2)} = -\frac{1}{2\pi} \frac{\gamma}{t_1 - t_2 + i0^+}. \quad (3.16)$$

Hasta acá, las ecuaciones de movimiento para las funciones de Green (Ecs. (3.7) y (3.8)) junto a las aproximaciones para las autoenergías Ecs. (3.12) y (3.16), son válidas cualquiera sea la dependencia temporal $\Delta(t)$ autoconsistente o no. Para hacer el

cálculo autoconsistente uno necesita calcular el parámetro de orden superconductor en cada paso de integración dt a través de la Ec. (3.4).

En cuanto a los mecanismos de relajación de energía, debemos señalar que, en este trabajo, no estamos interesados en analizar los efectos de algún reservorio en particular. El objetivo es considerar un mecanismo de relajación genérico debido a la presencia de un baño térmico. En este caso, por simplicidad, dicho baño es descrito por un hamiltoniano de partícula libre en el límite de banda ancha. Si bien en este trabajo nos limitamos a dicha aproximación, extenderla para tener en cuenta cierta estructura electrónica del baño es inmediata. Más importante aun, la posibilidad de tener en cuenta mecanismos de relajación desde el punto de vista microscópico a través de nuevas autoenergías resulta formalmente factible dentro del presente formalismo. Por ejemplo, uno podría tener en cuenta relajación mediada por interacciones residuales electrón-fonón o electrón-electrón introduciendo diagramas de Feynman a distintos órdenes en la interacción correspondiente en el dominio del tiempo.

3.1.3. Estado de equilibrio en presencia de disipación

El presente formalismo permite estudiar los efectos que produce el acoplamiento con un baño externo sobre el parámetro de orden superconductor también en el régimen de equilibrio. Para un superconductor BCS con una constante de interacción atractiva λ independiente del tiempo, el acoplamiento del sistema al reservorio o los efectos de dispersión inelástica influyen determinantemente sobre el parámetro de orden superconductor. De hecho, la dispersión inelástica es un mecanismo que rompe pares de Cooper y como consecuencia el parámetro de orden superconductor disminuye. Normalmente, este tipo de fenomenología se introduce de modo *ad-hoc* (sin ningún argumento formal) para explicar resultados experimentales de DOS en superconductores usando microscopía de efecto túnel. En nuestro caso, este tipo de efecto es fundamentado desde el punto de vista teórico y surge naturalmente del acoplamiento del sistema a un baño externo como demostraremos más adelante.

En equilibrio, el sistema preserva su invarianza temporal y la función de Green retardada en presencia de disipación viene dada por Ec. (3.14) donde $G_k^{R(0)}(t, t') \equiv G_k^{R(0)}(t - t')$ depende solamente de $t - t'$ y se puede obtener evaluando directamente el valor de expectación de la Ec. (3.1). Para ello, lo más conveniente es escribir los operadores electrónicos $c_{k\sigma}(t)$ en términos de los Bogoliubones $\gamma_{k\sigma}(t)$ cuya dependencia temporal en la representación de Heisenberg es inmediata teniendo en cuenta que el hamiltoniano BCS en equilibrio no depende del tiempo y es diagonal en esta base. De ahí, es fácil obtener que $\gamma_{k\sigma}(t) = \gamma_{k\sigma} e^{-iE_k t}$. Teniendo en cuenta que

el estado fundamental es el vacío de bogoliubones se obtiene finalmente que

$$\mathbf{G}_k^{R(0)}(t-t') = -i\Theta(t-t') \begin{pmatrix} u_k^2 e^{-iE_k(t-t')} + v_k^2 e^{iE_k(t-t')} & -u_k v_k (e^{-iE_k(t-t')} - e^{iE_k(t-t')}) \\ -u_k v_k (e^{-iE_k(t-t')} - e^{iE_k(t-t')}) & u_k^2 e^{iE_k(t-t')} + v_k^2 e^{-iE_k(t-t')} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

donde

$$E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_0^2}, \quad u_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_k}{E_k} \right), \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_k}{E_k} \right), \quad (3.18)$$

siendo Δ_0 el parámetro de orden superconductor en equilibrio (antes del cambio súbito en la interacción atractiva) el cual consideraremos real sin pérdida de generalidad. Para obtener dicho parámetro de orden uno necesita calcular la función de Green menor en equilibrio para $t = t'$ y sustituirla en la Ec. (3.4). Esta función de Green puede obtenerse de la Ec. (3.8) usando las funciones de Green retardada y avanzada de equilibrio y la autoenergía menor Ec. (3.16) que hemos propuesto en la sección anterior. Un procedimiento similar fue realizado recientemente en Ref. [83] pero en el límite trivial de $\gamma \rightarrow 0$. A continuación generalizaremos este procedimiento y encontraremos una expresión analítica exacta para $\mathbf{G}_k^<(t, t) \equiv \mathbf{G}_k^<(t)$ y el parámetro de orden Δ_0 para todo valor de γ . Sustituyendo la función de Green retardada Ec. (3.14), la función de Green avanzada que se obtiene por conjugación y la Ec. (3.16) en la Ec. (3.8), uno obtiene que para $t = t'$

$$\mathbf{G}_k^<(t)_{11} = -\frac{\gamma e^{-\gamma t}}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^t dt_2 \frac{e^{\gamma(t_1+t_2)/2}}{t_1 - t_2 + i0^+} (u_k^2 e^{iE_k(t_1-t_2)} + v_k^2 e^{-iE_k(t_1-t_2)}), \quad (3.19)$$

$$\mathbf{G}_k^<(t)_{12} = \frac{i\gamma u_k v_k e^{-\gamma t}}{\pi} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^t dt_2 \frac{e^{\gamma(t_1+t_2)/2}}{t_1 - t_2 + i0^+} \sin(E_k(t_1 - t_2)), \quad (3.20)$$

$\mathbf{G}_k^<(t)_{21} = \mathbf{G}_k^<(t)_{12}$ y $\mathbf{G}_k^<(t)_{22} = \mathbf{G}_k^<(t)_{11}$ si intercambiamos u_k^2 por v_k^2 y viceversa. Introduciendo el cambio de variables $T = (t_1 + t_2)/2$ y $\tau = t_1 - t_2$, podemos escribir

$$\mathbf{G}_k^<(t)_{11} = -\frac{\gamma e^{-\gamma t}}{2\pi} \int_{-\infty}^t dT e^{\gamma T} \int_{-2(t-T)}^{2(t-T)} d\tau \left[\frac{\cos(E_k \tau)}{\tau + i0^+} + i \frac{(u_k^2 - v_k^2) \sin(E_k \tau)}{\tau + i0^+} \right] \quad (3.21)$$

y

$$\mathbf{G}_k^<(t)_{12} = \frac{i\gamma u_k v_k e^{-\gamma t}}{\pi} \int_{-\infty}^t dT e^{\gamma T} \int_{-2(t-T)}^{2(t-T)} d\tau \frac{\sin(E_k \tau)}{\tau + i0^+}. \quad (3.22)$$

Dado que

$$\int_{-2(t-T)}^{2(t-T)} d\tau \frac{\sin(E_k \tau)}{\tau + i0^+} = 2\text{Si}(2E_k(t-T)), \quad (3.23)$$

donde $\text{Si}(x) = \int_0^x \frac{\sin(t)}{t} dt$ es la función seno integral, y

$$\int_{-2(t-T)}^{2(t-T)} d\tau \frac{\cos(E_{\mathbf{k}}\tau)}{\tau + i0^+} = -i\pi, \quad (3.24)$$

se obtiene que

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t)_{11} = \frac{i}{2} - \frac{i\gamma\xi_{\mathbf{k}}e^{-\gamma t}}{\pi E_{\mathbf{k}}} \int_{-\infty}^t dT e^{\gamma T} \text{Si}(2E_{\mathbf{k}}(t-T)) \quad (3.25)$$

y

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t)_{12} = \frac{i\gamma\Delta_0 e^{-\gamma t}}{\pi E_{\mathbf{k}}} \int_{-\infty}^t dT e^{\gamma T} \text{Si}(2E_{\mathbf{k}}(t-T)). \quad (3.26)$$

Finalmente, después de calcular estas integrales la función de Green menor en equilibrio para $t = t'$ viene dada por

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t) = \frac{i}{2}\mathbf{I} - \frac{i}{\pi E_{\mathbf{k}}} \arctan\left(\frac{2E_{\mathbf{k}}}{\gamma}\right) \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & -\Delta_0 \\ -\Delta_0 & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

De la ecuación anterior resulta inmediato que el *gap* superconductor $\Delta_0 = -i\lambda_0 \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t)_{12}$ satisface la ecuación trascendente

$$1 = \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\lambda}{E_{\mathbf{k}}} \arctan\left(\frac{2E_{\mathbf{k}}}{\gamma}\right). \quad (3.28)$$

Nótese que en el límite $\gamma \rightarrow 0$ la función $\arctan\left(\frac{2E_{\mathbf{k}}}{\gamma}\right) \rightarrow \pi/2$ y, como era de esperar, la Ec. (3.28) se reduce a la ecuación del *gap* BCS usual hallada en el capítulo anterior (ver Ec. (2.17) en el límite de temperatura nula). La dependencia del parámetro de orden como función de γ se obtiene de resolver numéricamente la Ec. (3.28). Como puede verse en la Figura 3.3, Δ_0 disminuye al aumentar γ , similar a lo que ocurre con el *gap* superconductor al aumentar la temperatura en el marco de la teoría de BCS de equilibrio y en ausencia de un baño térmico. Sin embargo, debemos aclarar que la dependencia con la que disminuye el parámetro de orden para un sistema aislado en equilibrio como función de la temperatura o como función de γ , es distinta en cada caso [comparar la Ec. (2.17) con la Ec. (3.28)].

Finalmente, debemos señalar que el acoplamiento con el baño que hemos introducido aquí, permite justificar formalmente una fórmula para la densidad de estados $\rho(\omega)$ ampliamente utilizada para explicar experimentos de microscopía de efecto túnel en superconductores, postulada originalmente desde un punto de vista

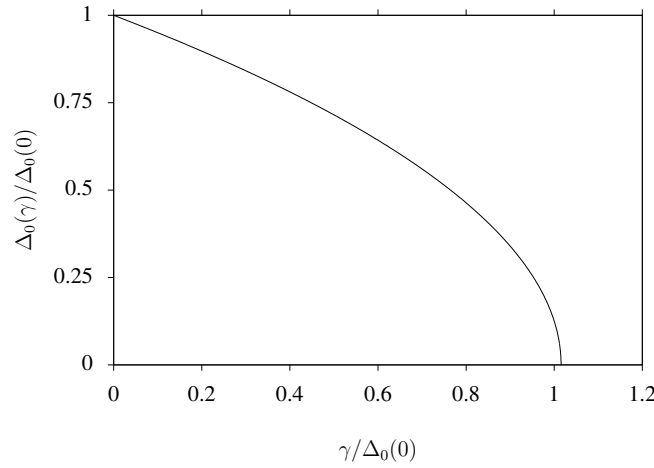


Figura 3.3: Parámetro de orden superconductor Δ_0 en equilibrio como función de γ . Ambas cantidades están normalizadas al valor del parámetro de orden en ausencia de disipación ($\gamma = 0$) $\Delta_0(0)$.

fenomenológico. Nos referimos a la fórmula de Dynes

$$\rho(\omega) = \rho_N \left| \operatorname{Re} \left[\frac{\omega + i\Gamma}{\sqrt{(\omega + i\Gamma)^2 - \Delta_0^2}} \right] \right|, \quad (3.29)$$

donde ρ_N es la densidad de estados en la fase normal y Γ cuantifica los procesos presentes en la muestra que rompen pares de Cooper, lo cual se conoce como parámetro de Dynes [90, 91]. Existen varias propuestas teóricas que justifican el uso de la Ec. (3.29) haciendo uso del formalismo de Eliashberg [92], considerando tunelaje inelástico en experimentos de transporte [93] o debido a la presencia de impurezas magnéticas [90, 91]. A continuación demostramos que la fórmula de Dynes surge naturalmente en nuestro formalismo al considerar un superconductor acoplado a un reservorio externo en el límite de banda ancha y permite vincular directamente la DOS de equilibrio con el parámetro γ . Por supuesto, dado que no estamos considerando un modelo microscópico para el baño, nuestra justificación teórica es todavía semi-fenomenológica.

3.1.4. Justificación de la fórmula de Dynes

Dado que estamos en equilibrio y todas las funciones de Green dependen de $(t - t')$ conviene ir al espacio de frecuencias. Si transformamos Fourier la función de Green retardada $\mathbf{G}_k^{R(0)}(t - t')$ Ec. (3.17) obtenemos

$$\mathbf{G}_k^{R(0)}(\omega) = \frac{\omega I + \xi_k \sigma_z + \Delta_0 \sigma_x}{\omega^2 - \xi_k^2 - \Delta_0^2} \quad (3.30)$$

donde I es la matriz unidad de 2×2 y σ_z, σ_x son las matrices de Pauli z y x en el espacio de Nambu. Dicha ecuación no es otra cosa que la función de Green de partícula libre asociada al Hamiltoniano \mathbf{H}_k solución de la ecuación

$$(\omega I - \mathbf{H}_k) \mathbf{G}_k^{R(0)}(\omega) = I. \quad (3.31)$$

En este caso, la función espectral $A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\mathbf{G}_k^{R(0)}(\omega + i0^+) \right]$ viene dada por

$$A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{\omega + i0^+ + \xi_k}{(\omega + i0^+)^2 - E_k^2} = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \left[\frac{1}{\omega - E_k + i0^+} - \frac{1}{\omega + E_k + i0^+} \right] \frac{\omega + \xi_k}{2E_k} \right\} \quad (3.32)$$

que resulta

$$A(\mathbf{k}, \omega) = [\delta(\omega - E_k) - \delta(\omega + E_k)] \frac{\omega + \xi_k}{2E_k}. \quad (3.33)$$

Finalmente la densidad de estados $\rho_0(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega)$ pasando del discreto al continuo puede escribirse como

$$\rho_0(\omega) = \rho_N \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{1}{2} \left\{ \left[1 + \frac{\xi}{E} \right] \delta(\omega - E) - \left[1 - \frac{\xi}{E} \right] \delta(\omega + E) \right\}. \quad (3.34)$$

Dado que $E \geq 0$ uno puede considerar solo la primera o la segunda integral dependiendo si $\omega > 0$ o $\omega < 0$ respectivamente. Basta considerar $\omega > 0$ pues el problema posee simetría electrón-hueco y para $\omega < 0$ tendríamos la misma densidad de estados. En este caso,

$$\rho_0(\omega) = \rho_N \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{1}{2} \delta(\omega - E) \quad (3.35)$$

$$\rho_0(\omega) = 2\rho_N \int_{\Delta_0}^{+\infty} dE \frac{d\xi}{dE} \frac{1}{2} \delta(\omega - E) = \rho_N \int_{\Delta_0}^{+\infty} dE \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta_0^2}} \delta(\omega - E) \quad (3.36)$$

con lo cual

$$\rho_0(\omega) = \rho_N \left| \frac{\omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta_0^2}} \right| \quad (3.37)$$

que es la densidad de estado de un superconductor BCS de *gap* Δ_0 en ausencia de disipación o procesos que rompen pares de Cooper. Dicha ecuación coincide con la Ec. (3.29) en el límite $\Gamma \rightarrow 0$. De hecho, la DOS dada por la Ec. (3.29) puede escribirse como $\rho(\omega) = \rho_0(\omega + i\Gamma)$.

Para el modelo de disipación que hemos discutido anteriormente, el acoplamiento del superconductor al baño externo da lugar a la función de Green retardada $\mathbf{G}_k^R(t - t') = \mathbf{G}_k^{R(0)}(t - t')e^{-\gamma(t-t')/2}$. La transformada de Fourier de dicha función

viene dada por el producto de convolución

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{R(0)}(\omega - \omega') \frac{\Gamma/\pi}{\omega'^2 + \Gamma^2} \quad (3.38)$$

donde el segundo término, en el lado derecho de la ecuación, corresponde a la transformada de Fourier explícita de la exponencial $e^{-\Gamma(t-t')}$ con $\Gamma = \gamma/2$. Uno ahora puede tomar la parte imaginaria de $\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^R(\omega + i0^+)$, sumar en \mathbf{k} y obtener la DOS, lo cual da lugar a

$$\rho(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \rho_0(\omega - \omega') \frac{\Gamma/\pi}{\omega'^2 + \Gamma^2} \quad (3.39)$$

que efectivamente es igual a $\rho_0(\omega + i\Gamma)$. Basta plantear la transformada de Fourier de $\rho_0(\omega + i\Gamma)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_0(\omega + i\Gamma) e^{i\omega t} = e^{\Gamma t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho_0(\omega) e^{i\omega t}$$

y ver que

$$\rho_0(\omega + i\Gamma) = \mathcal{F} [\mathcal{F}^{-1}(\rho_0(\omega)) e^{\Gamma t}] = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \rho_0(\omega - \omega') \frac{\Gamma/\pi}{\omega'^2 + \Gamma^2}$$

coincide con la Ec. (3.39) y por tanto $\rho(\omega) = \rho_0(\omega + i\Gamma)$.

En la Figura 3.4 se muestra la densidad de estados Ec. (3.29) para distintos valores de Γ . Puede verse cómo los picos de coherencia se ensanchan y el parámetro de orden disminuye al aumentar Γ . Debemos hacer notar que para $\Gamma \neq 0$, no existe un *gap* superconductor estrictamente hablando debido a que la densidad de estados para energías menores que Δ_0 es exponencialmente chica pero no cero. Uno habla de *gap* cuando no hay estados disponibles. Este es el motivo fundamental por el cual nos referiremos a Δ_0 como parámetro de orden superconductor en lugar de *gap* superconductor cuando consideremos que el sistema está acoplado a un reservorio.

3.1.5. Dinámica fuera de equilibrio

La función de Green menor fuera de equilibrio, a temperatura cero, para $t = t'$ puede ser calculada usando las Ecs. (3.14), (3.8) y (3.16) lo cual da lugar a la ecuación

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t) = -\frac{\gamma e^{-\gamma t}}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^t dt_2 \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{R(0)}(t, t_1) \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{A(0)}(t_2, t) \frac{e^{\gamma(t_1+t_2)/2}}{t_1 - t_2 + i0^+} \quad (3.40)$$

Con el objetivo de obtener una mejor eficiencia computacional en el cálculo de dicha función de Green, es más conveniente usar una ecuación diferencial en lugar de la expresión integral Ec. (3.40). Tomando la derivada temporal en ambos lados de la

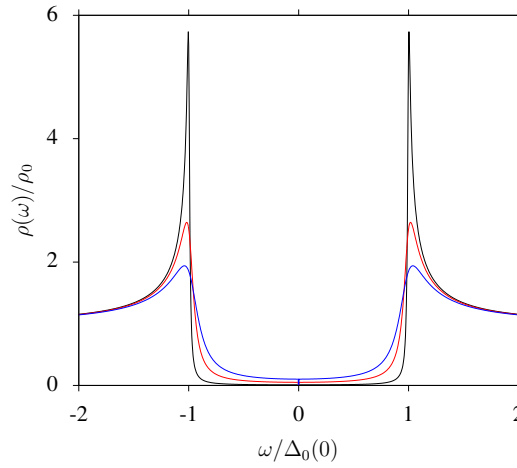


Figura 3.4: Densidad de estados para distintos valores de Γ . La curva negra corresponde a $\Gamma = 0.01\Delta_0(0)$, la roja a $\Gamma = 0.05\Delta_0(0)$, y la azul a $\Gamma = 0.1\Delta_0(0)$.

Ec. (3.40) y haciendo uso de la regla integral de Leibniz se obtiene

$$\partial_t \mathbf{G}_k^<(t) = -\gamma \mathbf{G}_k^<(t) + \mathcal{I}_k(t) - i[\mathbf{H}_k(t), \mathbf{G}_k^<(t)] , \quad (3.41)$$

donde

$$\mathcal{I}_k(t) = \frac{i\gamma}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt' \left(\frac{\mathbf{G}_k^{R(0)}(t, t')}{t - t' - i0^+} + \frac{\mathbf{G}_k^{R(0)}(t, t')^\dagger}{t - t' + i0^+} \right) e^{-\frac{\gamma(t-t')}{2}}. \quad (3.42)$$

En equilibrio, se obtiene, haciendo el mismo tipo de integrales que en la sección pasada, que el segundo término del lado derecho de la Ec. (3.41) se cancela exactamente con el primero, y dado que $\mathbf{G}_k^<(t)$ [Ec. (3.27)] conmuta con el hamiltoniano uno recupera el estado estacionario. Por otro lado, en ausencia de disipación, los dos primeros términos del lado derecho de la Ec. (3.41) son nulos y la evolución de la función de Green menor viene dada solamente por el conmutador con el hamiltoniano. Esta ecuación de movimiento permite encontrar la dependencia temporal del parámetro de orden en ausencia de disipación a través de la Ec. (3.4) lo cual arroja el mismo resultado que se obtiene si se usan las ecuaciones de los pseudospines discutidas en el capítulo anterior. En este caso, ambos tratamientos son equivalentes. El efecto que produce el acoplamiento con el baño ($\gamma \neq 0$), desde el punto de vista matemático, es introducir memoria en el sistema de forma tal que para encontrar la evolución temporal de la función de Green, en lugar de una ecuación diferencial local en el tiempo (como lo son las Ecs. (3.6)) uno necesita resolver una ecuación integrodiferencial la cual depende de la evolución temporal en el pasado a través de la Ec. (3.42).

3.2. Resultados

A continuación presentaremos la evolución temporal del parámetro de orden superconductor debido a un cambio súbito de la interacción atractiva $\lambda(t) = \Theta(-t)\lambda_0 + \Theta(t)\lambda_f$ como lo hicimos en el capítulo anterior pero ahora en presencia de disipación provista por el baño. Como en el caso de los pseudoespines, la Ec. (3.41) es integrada usando un método de Runge-Kutta de cuarto orden con un paso de tiempo dt suficientemente chico de modo tal que el error cometido en el cálculo del $\Delta(t)$ es menor a 10^{-6} para todo t . La función de Green menor en equilibrio, para $t < 0$, constituye la condición inicial para la ecuación diferencial Ec. (3.41) la cual viene dada por la Ec. (3.27). Una vez se produce el cambio súbito en λ el sistema tiene una interacción atractiva que no se corresponde con la del estado fundamental y por tanto el parámetro de orden superconductor cambia en el tiempo. Para integrar la ecuación de movimiento un paso de tiempo $t + dt$, primero integramos la tercera Ec. (3.6) en t' desde t hasta $t - 10/\gamma$ (tiempo a partir del cual el integrando de la Ec. (3.42) es prácticamente nulo). Esto se usa para construir el kernel de memoria Ec. (3.42) al tiempo t necesario para calcular la función de Green menor en $t + dt$ siguiendo la Ec. (3.41). En cada paso de tiempo, el nuevo valor de $\Delta(t)$ es calculado y reinsertado en el hamiltoniano de BCS $H_k(t)$ que rige la evolución temporal de las funciones de Green retardadas (ver Ec. 3.6). Dado que estamos interesados en el régimen de baja temperatura, en los cálculos que siguen se usan las expresiones en el límite de temperatura cero dadas por las Ecs. (3.16) y (3.40).

Como en el capítulo anterior, el cambio súbito de la interacción atractiva ha sido parametrizado por el cociente Δ_0/Δ_f , donde Δ_0 y Δ_f son los parámetros de orden que satisfacen la Ec. (3.28) para λ_0 y λ_f , respectivamente. Nótese que estos parámetros de orden corresponden al problema con disipación (superconductor acoplado a un baño térmico). De esta forma, un valor constante de Δ_0/Δ_f para diferentes valores de γ implica diferentes cambios en λ . A continuación, mostramos resultados para cambios súbitos moderados y cambios súbitos grandes los cuales permiten acceder, en el régimen sin disipación, a las fases dinámicas I, II y III.

La Fig. 3.5 muestra la respuesta superconductora para cambios moderados de la interacción atractiva y distintos valores de γ . Los paneles (a), (b) y (c) corresponden a un incremento súbito de la interacción atractiva tal que $\Delta_0/\Delta_f = 0.4$ y donde γ disminuye de arriba hacia abajo. En ausencia de disipación el parámetro de orden oscila con la frecuencia de Higgs $2\Delta_\infty$ y se estabiliza a tiempo largos a un valor $\Delta_\infty < \Delta_f$ (fase dinámica I). Esto se muestra como referencia en el inset del panel (a) para compararla con las correspondientes dinámicas en presencia de relajación de energía. El efecto del baño en la dinámica superconductora es (i) amortiguar las oscilaciones e (ii) introducir un efecto de termalización en el cual el parámetro de

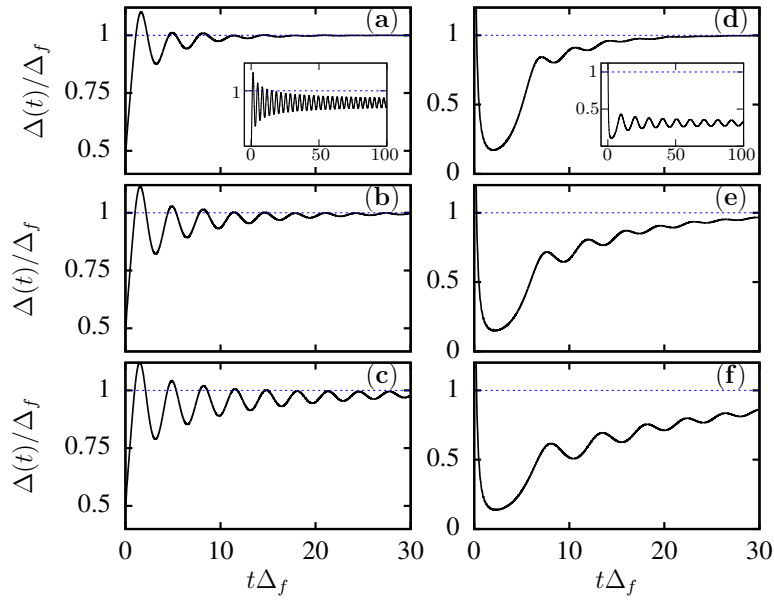


Figura 3.5: Dependencia temporal del parámetro de orden superconductor para $\Delta_0/\Delta_f = 0.4$ (a-c) y $\Delta_0/\Delta_f = 4$ (d-f). El panel superior, intermedio e inferior corresponden con los valores $\gamma = 0.2\Delta_f$, $\gamma = 0.1\Delta_f$ y $\gamma = 0.05\Delta_f$ respectivamente. En el inset de los paneles (a) y (d) se muestra $\Delta(t)$ sin disipación ($\gamma = 0$) para $\Delta_0/\Delta_f = 0.4$ y $\Delta_0/\Delta_f = 4$ respectivamente.

orden superconductor tiende suavemente a Δ_f . De esta forma Δ_∞ es reemplazado por el valor de equilibrio del parámetro de orden a $T = 0$ (Δ_f).

En los paneles (d), (e) y (f) mostramos la dinámica correspondiente a una pequeña disminución de la interacción atractiva. En este caso el parámetro de orden decrece rápidamente a tiempos muy cortos y después “rebota” dando lugar a oscilaciones de Higgs. También en este caso el valor asintótico del parámetro de orden en ausencia de disipación es $\Delta_\infty < \Delta_f$ como se observa en el inset del panel (d). En este caso, otra vez el efecto del baño amortigua las oscilaciones y hace que el parámetro de orden tienda al valor de equilibrio Δ_f en una escala de tiempo característica que aumenta al disminuir γ .

El comportamiento para cambios grandes en la interacción atractiva se muestra en la Fig. 3.6. En los paneles (a), (b) y (c) el parámetro de orden aumenta y el sistema entra en un régimen de sincronización (fase III) para $\gamma = 0$ como puede verse en el inset del panel (a). Dado que para valores cada vez más chicos de γ la simulación se vuelve más costosa desde el punto de vista de tiempo de cálculo (para cada paso de tiempo dt hay que calcular una integral con límites de integración cada vez más alejados correspondiente al kernel de memoria Ec. (3.42)), en este trabajo tomamos valores de γ tales que el tiempo característico $1/\gamma$ es del mismo orden que la ventana de la simulación ($t\Delta_f < 30$) o más chica. Para estos parámetros, la termalización tiene lugar a tiempos tales que las fase sincrónica (fase III) y la fase de oscilaciones de Higgs (fase I) son muy parecidas y difícilmente distinguibles en experimentos reales (compare la primera columna de la Fig. 3.5 con la primera columna de la

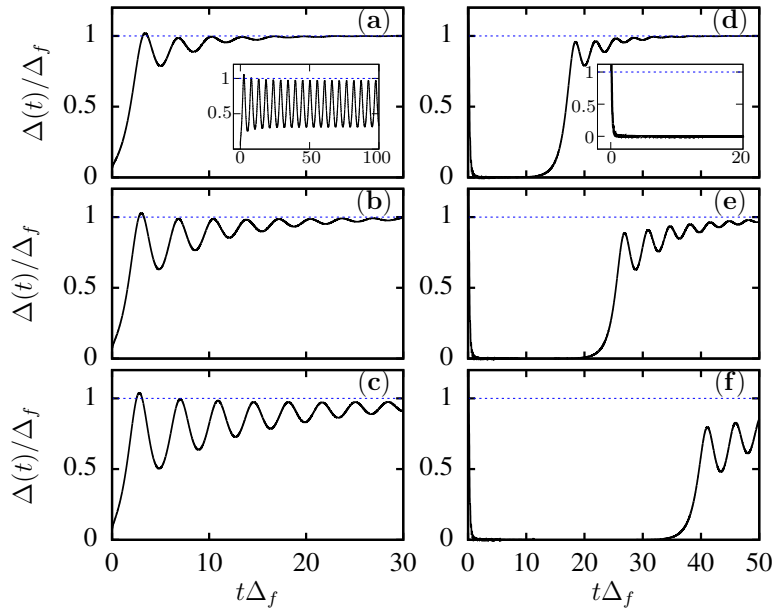


Figura 3.6: Dependencia temporal del parámetro de orden superconductor para $\Delta_0/\Delta_f = 0.05$ (a-c) y $\Delta_0/\Delta_f = 8$ (d-f). El panel superior, intermedio e inferior corresponden con los valores $\gamma = 0.2\Delta_f$, $\gamma = 0.1\Delta_f$ y $\gamma = 0.05\Delta_f$ respectivamente. En el inset de los paneles (a) y (d) se muestra $\Delta(t)$ sin disipación ($\gamma = 0$) para $\Delta_0/\Delta_f = 0.05$ and $\Delta_0/\Delta_f = 8$ respectivamente.

Fig. 3.6).

Por otro lado, en la Fig. 3.6 (d), (e) y (f) se muestran los resultados para una disminución grande de la interacción atractiva que corresponden a la dinámica sobreamortiguada del parámetro de orden para un sistema aislado (fase dinámica II) como se muestra en el inset de la Fig. 3.6 (d). Como consecuencia del cambio súbito en λ , el parámetro de orden decrece exponencialmente a un valor muy chico y permanece en dicho valor durante un intervalo de tiempo que depende del parámetro γ . En este lapso de tiempo el sistema termaliza transfiriendo energía al baño sin ningún efecto apreciable en la dinámica $\Delta(t)$. Notablemente, en algún momento el número de excitaciones se hace suficientemente chico y se produce un incremento del parámetro de orden. De ahí en adelante, se observan oscilaciones en $\Delta(t)$ las cuales se amortiguan exponencialmente en el tiempo según $e^{-\gamma t}$ y finalmente $\Delta(t)$ tiende al valor asintótico Δ_f .

Para entender mejor este último comportamiento hemos estudiado cómo evolucionan en el tiempo la energía total $E_T = \langle H_{MF} \rangle$ y la energía cinética E_K del sistema. En términos de la función de Green menor uno puede escribir $E_K(t) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma}(t) = -i \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} [\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t)_{11} - \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t)_{22}]$ donde $n_{\mathbf{k}\sigma}$ es el valor de expectación del operador número de electrones en el estado \mathbf{k} con espín σ . Por otro lado, la energía de interacción en la aproximación de campo medio viene dada por $E_i(t) = -\Delta(t)^2/\lambda(t)$ y la energía total es $E_T(t) = E_K(t) + E_i(t)$. En la Fig. 3.7 se puede comparar la evolución de la energía cinética y la energía total con la dinámica de $\Delta(t)$ para los parámetros utilizados en la Fig. 3.6 (d). Nótese que a tiempos muy cortos

($t\Delta_f < 0.5$), después del cambio instantáneo en la interacción atractiva, la energía cinética es mayor que la energía total del sistema indicando la existencia de una energía de interacción residual $E_i(t)$ negativa. En un primer transitorio de tiempo $E_K(t)$ y $\Delta(t)$ decrecen exponencialmente y $\Delta(t)$ tiende a cero en la escala de la figura, mientras que la energía de interacción (no se muestra en la figura) va a cero desde valores negativos. A $t\Delta_f \sim 1$ el efecto neto que produce la perturbación $\lambda(t)$ es un exceso de energía total constituida principalmente de energía cinética. Al transcurrir el tiempo, el exceso de energía cinética se transfiere al baño a un ritmo exponencial (como $e^{-\gamma t}$). En este régimen, el sistema se comporta como una colección de electrones libres con una distribución no térmica que corresponde al sistema fuera de equilibrio. Para $t\Delta_f \sim 10$ resulta más favorable desde el punto de vista energético volver a formar pares de Cooper. En esta instancia se construye de forma natural un nuevo estado superconductor, la energía cinética E_K aumenta como resultado de la formación de pares de Cooper, en tanto la energía total del sistema disminuye mostrando un pequeño hombro como se aprecia en la figura. El sistema rápidamente se vuelve superconductor otra vez con un orden de largo alcance bien establecido lo cual es energéticamente más conveniente. Para tiempos largos, la energía total del sistema evoluciona hacia su valor de equilibrio final correspondiente a λ_f y Δ_f . El proceso completo se asemeja a un proceso de calentamiento del sistema debido a la perturbación externa seguido de un enfriamiento brindado por el contacto con el baño. Sin embargo, debemos señalar que solo cuando el superconductor alcance el equilibrio con el baño es posible definir una temperatura (cero en nuestro caso). Muy distinto de esta situación, el renacimiento de la superconductividad que se observa en la dinámica del parámetro de orden, es un fenómeno transitorio que se produce antes de que el sistema llegue a un estado estacionario.

3.3. Conclusiones

En este capítulo, hemos desarrollado un formalismo que nos permite incluir perturbativamente y de modo autoconsistente los efectos de un reservorio en la dinámica no lineal de un superconductor BCS fuera de equilibrio. En particular, hemos considerado un mecanismo de relajación inelástico debido al acoplamiento del sistema con un baño externo que se encuentra en equilibrio y a temperatura cero. La interacción del superconductor con su entorno ha sido considerada teniendo en cuenta una autoenergía a segundo orden en el acoplamiento superconductor-baño en el límite de banda ancha. Hemos analizado cómo la disipación afecta la dinámica del parámetro de orden para el problema de un cambio súbito en la interacción atractiva. En todos los casos la acción de $\lambda(t)$ implica un exceso de energía en el sistema respecto

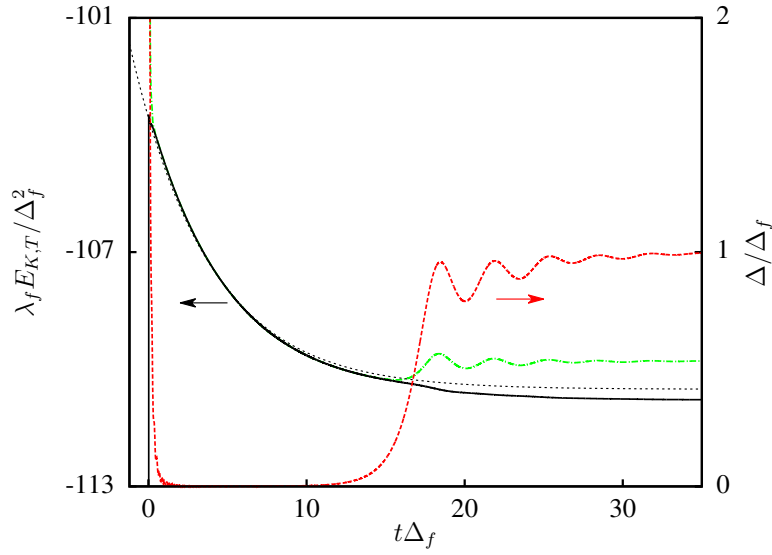


Figura 3.7: Energía cinética (línea punteada discontinua en verde), parámetro de orden superconductor (línea discontinua roja) y la energía total (línea sólida) como función del tiempo para $\Delta_0/\Delta_f = 8$ y $\gamma = 0.2\Delta_f$ como en la Fig. 3.6 (d). La línea punteada representa la función $7e^{-\gamma t} - 110.5$ lo cual demuestra el comportamiento exponencial de $E_T \sim E_K$ en una región intermedia donde $\Delta(t) \sim 0$.

al estado fundamental final correspondiente a λ_f . En ausencia de disipación, esta energía permanece almacenada en el sistema y el parámetro de orden alcanza un valor estacionario menor que el valor en equilibrio o muestra oscilaciones persistentes. Claramente, el efecto del baño es absorber toda esta energía extra, permitiendo al sistema alcanzar un estado de equilibrio a tiempos largos.

Debemos señalar que nuestros resultados fueron obtenidos usando un tiempo de relajación independiente del momento \mathbf{k} . Dicha aproximación está bien justificada si consideramos que los mecanismos que sacan de equilibrio al sistema y por tanto toda la dinámica del problema, tienen lugar dentro de una pequeña ventana de energía alrededor de la energía de Fermi. No obstante, una extensión para incluir relajación dependiente de \mathbf{k} , tanto para obtener el valor de equilibrio Δ_f o la respuesta transitoria, es inmediata reemplazando γ por $\gamma_{\mathbf{k}}$ en las expresiones anteriores.

Para $t \gg \tau = 1/\gamma$ el parámetro de orden alcanza su equilibrio térmico $\Delta(t \rightarrow \infty) = \Delta_f$ cualquiera sea (grande o pequeño) el cambio en la interacción atractiva. Como mostramos en el capítulo anterior, en el régimen de acoplamiento débil BCS y sin disipación, un cambio pequeño de λ excita el modo de Higgs cuyas oscilaciones decaen siguiendo una ley de potencia $t^{-1/2}$ debido al desfase que produce el continuo de cuasipartículas [12, 64]. En cambio, en el régimen de acoplamiento fuerte, el exponente de esta ley de potencia cambia de $-1/2$ a $-3/2$ [94]. También ha sido mostrado que para sistemas aislados, en el régimen de acoplamiento fuerte con interacciones no locales, la fase sincrónica (fase dinámica III) es mucho más estable y el modo de Higgs no se amortigua en el tiempo tanto para un aumento o

disminución de la interacción atractiva [95]. Por otra parte, recientemente ha sido mostrado que el exponente con el que se amortiguan las oscilaciones del parámetro de orden depende sensiblemente de la dimensionalidad del sistema cuando uno va del régimen de acoplamiento débil (BCS) al régimen de acoplamiento fuerte [96].

Todas estas propiedades asintóticas se manifiestan a tiempos largos. Por tanto, aún para pequeños valores de γ el decaimiento exponencial que hemos obtenido al introducir el acoplamiento con un baño térmico, domina sobre cualquier ley de potencia, haciendo muy difícil concluir que tipo de fase dinámica se observa en el experimento. En particular, discernir entre un tipo u otro de exponente de la ley de potencia o distinguir el carácter persistente de las oscilaciones de las oscilaciones amortiguadas, puede resultar engorroso en sistemas de materia condensada. Experimentos en átomos ultrafríos fermiónicos, con un alto grado de coherencia y con un buen control de la constante de interacción, podrían ofrecer nuevas oportunidades para observar la física descrita en estos dos primeros capítulos.

En el procesamiento de la información cuántica, explotar los efectos no lineales que aparecen cuando elementos superconductores acoplados entre sí son excitados por un perturbación externa dependiente del tiempo son de gran relevancia [97]. De suma importancia es entonces cuantificar el papel que juega el entorno en este tipo de manipulaciones. Los cálculos y la forma de introducir disipación en el superconductor a través de perturbaciones diagramáticas para el problema fuera de equilibrio, es un primer paso en este sentido. Una de las ventajas del formalismo presentado en este capítulo, es que permite incluir otros mecanismos de relajación desde el punto de vista microscópico (por ejemplo interacciones electrón-electrón, electrón-fonón, impurezas, etcétera) y analizar consecuentemente el efecto que produce cada uno de ellos en la respuesta dinámica del superconductor, lo cual constituye un interesante tópico para trabajos futuros.

Capítulo 4

Modos Rabi-Higgs en presencia de perturbaciones periódicas

Hasta el momento hemos analizado la respuesta no lineal de un superconductor BCS debido a un cambio instantáneo de un parámetro del hamiltoniano, lo cual constituye el protocolo de control más simple posible desde el punto de vista teórico. En este capítulo, estudiamos cómo responde el *gap* superconductor en presencia de perturbaciones periódicas dependientes del tiempo que actúan durante un tiempo relativamente largo (más allá del esquema de pulsos ultracortos como el que se utiliza en técnicas de espectroscopías ópticas de *pump & probe*). Se discutirán en detalle los distintos mecanismos a través de los cuales se puede estimular periódicamente al superconductor; radiación externa, fonones, etcétera, primero considerando un sistema perfectamente aislado para después, en el capítulo 5, introducir relajación del mismo modo que fue hecho en el capítulo anterior.

El uso de perturbaciones dependientes del tiempo (por ejemplo el campo electromagnético de la luz) para controlar las propiedades físicas en sistemas de materia condensada es una estrategia que se remonta a los años ´60 en el caso de los superconductores. Uno de los trabajos pioneros en el tema mostraba, experimentalmente, un aumento de la corriente crítica de un superconductor cuando éste era iluminado con una fuerte radiación de microondas [59, 60]. Dicho resultado experimental fue explicado primero por Eliashberg en el límite $T \rightarrow T_c$ [61] y considerando un régimen difusivo en el cual el tiempo de relajación es la escala temporal más pequeña del problema (el sistema termaliza muy rápidamente), de modo que es un resultado semiclásico y de cuasiequilibrio en el sentido que no requiere el cálculo de la dinámica transitoria de los observables como función del tiempo. La explicación física detrás de la formulación de Eliashberg es que, en presencia de microondas, la distribución de cuasipartículas no se corresponde con un estado térmico sino que es una distribución de cuasipartículas fuera de equilibrio que favorece la supercon-

ductividad (la ecuación del *gap* usando dicha distribución predice que, en el límite $T \rightarrow T_c$, el *gap* superconductor es mayor que su valor de equilibrio). Recientemente, el mismo problema, otra vez en el régimen difusivo, ha sido extendido, haciendo uso de las ecuaciones de Usadel, para tener en cuenta cómo cambia el *gap* y la corriente crítica para valores arbitrarios de la temperatura y frecuencia de la radiación [62]. Lo que concluye este estudio, es que el resultado de Eliashberg (aumento del *gap* superconductor y de la corriente crítica) vale también para temperaturas considerablemente menores que la T_c ($T_c \gtrsim T \gtrsim 0.5T_c$) y frecuencias de la radiación $\hbar\omega \gtrsim 3k_B T_c$.

En este capítulo, nos concentramos en un régimen totalmente diferente al considerado por Eliashberg. En particular, estudiaremos la respuesta del *gap* superconductor como función del tiempo suponiendo que la relajación o termalización ocurre a tiempos suficientemente largos (el tiempo de relajación es la escala de tiempo más grande del problema). De hecho, estamos interesados en estudiar la respuesta superconductora transitoria previa al estado de equilibrio termodinámico. Para ello usamos la teoría de BCS de no equilibrio formulada en los capítulos anteriores, en el límite de temperatura cero, en un régimen completamente opuesto al régimen difusivo y de cuasiequilibrio de Eliashberg. El objetivo es encontrar nuevas fases dinámicas o modos colectivos transitorios del *gap* superconductor lo cual resulta de fácil acceso experimental dada la disponibilidad actual de técnicas espectroscópicas con alta resolución temporal.

Los tiempos de relajación en ciertos superconductores pueden a menudo alcanzar la escala de nanosegundos a bajas temperaturas [98], mientras que las oscilaciones del parámetro de orden típicamente son apreciables en la escala de los femtosegundos. Esto nos da la pauta de que podría existir una amplia ventana temporal donde, en principio es posible observar la evolución del *gap* superconductor fuera de equilibrio antes de que el sistema alcance un estado estacionario intercambiando energía con su entorno. En este caso, para describir correctamente al sistema, alcanza con considerar un superconductor perfectamente aislado. No obstante, no podemos olvidar que, tal y como hemos discutido en el capítulo anterior, para tiempos largos la presencia inevitable de un baño externo y el acoplamiento del sistema con el mismo, produce efectos de termalización lo cual será objeto de estudio en el próximo capítulo. Por un lado, analizaremos la respuesta no lineal del superconductor sin intercambio de energía con un baño (válido solo para efectos dinámicos transitorios) y después estudiaremos el estado estacionario en presencia de mecanismos de relajación de energía.

En esta tesis, estudiamos los efectos de una perturbación periódica en el tiempo [54, 99] la cual se acopla a la amplitud del parámetro de orden superconductor. Discutiremos varios tipos de perturbaciones y cómo pueden ser realizadas en la

práctica. En principio, en sistemas atómicos ultrafríos las perturbaciones periódicas podrían ser implementadas sin dificultad, sabiendo que una de las mayores ventajas de dichos sistemas es la posibilidad de modificar, de manera precisa, los parámetros del hamiltoniano a voluntad [100, 101]. Por otro lado, en sistemas de materia condensada, uno podría pensar que el modelo en el que un parámetro del hamiltoniano es periódico en el tiempo es un poco menos realista teniendo en cuenta la complejidad intrínseca de este tipo de sistemas. Sin embargo, debemos señalar que, las primeras oscilaciones coherentes en condensados fermiónicos fuera de equilibrio fueron observadas experimentalmente en sistemas de estado sólido [11, 12, 66].

Los dos posibles parámetros a ser controlados son la interacción atractiva y la DOS. Modificar la densidad de estados en el nivel de Fermi mediante la excitación de modos colectivos de la red (fonones) en superconductores es una estrategia que ha sido propuesta hace varios años atrás [102, 103]. En el presente trabajo, además proponemos un mecanismo mediante el cual es posible modular periódicamente la interacción atractiva en superconductores no convencionales también mediante la excitación coherente de fonones.

Otro posible mecanismo de control es la dispersión Raman impulsiva estimulada (ISRS) [66, 104] o directamente el uso de radiación con frecuencias en el rango de los THz [11, 12, 56, 105–108] que se acopla a los electrones del sistema. La mayoría de los estudios de superconductividad fuera de equilibrio, se concentran en el uso de pulsos muy cortos con una frecuencia característica por debajo del *gap* superconductor en equilibrio (en el THz), pero suficientemente cerca de $2\Delta_0$ como para garantizar excitar, en algún orden, el espectro de cuasipartículas. La razón fundamental del uso de $\omega < 2\Delta_0$ es evitar el posible calentamiento de la muestra cuando se estimula con radiación de alta frecuencia, lo cual rompe pares y podría destruir la superconductividad. Nosotros en lo que sigue, nos concentramos en un régimen menos explorado: perturbaciones periódicas con frecuencias por encima de $2\Delta_0$, considerando que los posibles procesos de calentamiento que podría producir dicha excitación en el superconductor (debido a posible existencia de interacciones coulombianas residuales internas que facilitan la absorción de energía) tienen lugar en un tiempo característico suficientemente grande como para poder observar una respuesta superconductora no trivial a tiempos cortos. Debemos señalar además que existen otros mecanismos de excitación que no requieren la acción continua de radiación electromagnética, lo cual evitaría un posible calentamiento interno del material. Una alternativa es la excitación de un fonón óptico de larga duración (oscilaciones de la red con un amortiguamiento muy lento) haciendo uso de un único impulso de luz, siendo esta oscilación la propia perturbación periódica.

Para perturbaciones con frecuencia $\omega > 2\Delta_0$, un conjunto de cuasipartículas, cuyas energías coinciden aproximadamente con la frecuencia de la perturbación,

entra en resonancia y realiza oscilaciones de Rabi sincronizadas (modo colectivo), lo cual da lugar a una modulación lenta de la amplitud del parámetro de orden superconductor que hemos llamado modo Rabi-Higgs; cuya naturaleza es distinta al modo de Higgs discutido en los capítulos anteriores. Por lo general, en la literatura, el modo de Higgs se refiere al modo de amplitud del parámetro de orden superconductor que surge debido a la ruptura de la simetría global $U(1)$ del estado superconductor [11, 12]. Aquí por Rabi-Higgs nos referimos a un nuevo modo colectivo que corresponde con una modulación de la amplitud del parámetro de orden superconductor (es por eso que usamos la palabra "Higgs") como consecuencia de las oscilaciones de Rabi de la población de cuasipartículas en presencia de una perturbación periódica. Una importante consecuencia del modo Rabi-Higgs es que da lugar a una inversión de población periódica de las cuasipartículas en resonancia, con un período determinado por la amplitud del estímulo externo. Este resultado puede ser entendido, de manera simple, usando el formalismo de pseudoespines de Anderson y la aproximación de onda rotante (RWA), en analogía con la forma en la que se demuestran, teóricamente, la aparición de oscilaciones de Rabi en los experimentos de resonancia magnética nuclear (NMR). Este nuevo modo colectivo no lineal permite además explorar *todas* las fases dinámicas I, II y III discutidas previamente en sistemas de materia condensada sin necesidad de acudir a sistemas de átomos fríos. Controlando el tiempo al cual la perturbación periódica deja de actuar, en distintos instantes dentro de un período de Rabi (como en los protocolos de pulsos en los experimentos de NMR), uno puede acceder a dichas fases.

Además de los modos de amplitud neutrales uno puede considerar también modos de cargas. El modo de oscilación de carga más simple es el modo de sonido longitudinal el cual en superconductores es expulsado a la frecuencia de plasma debido al mecanismo de Anderson-Higgs [63]. Existen otros modos espontáneos de carga que dejan la celda unidad neutra en total pero que permiten fluctuaciones de carga dentro de la celda de acuerdo con la simetría de la red cristalina (ver Ecs. (4.12), (4.13) y (4.14) más adelante). Típicamente estos modos de cargas son Raman activos y producen una respuesta oscilante amortiguada de frecuencia $2\Delta_0$ (en lugar de la frecuencia de plasma) para perturbaciones pequeñas debido a que la interacción de Coulomb de largo alcance es en este caso poco relevante [56, 109, 110]. La contribución más importante de las interacciones coulombianas es de corto alcance. A distancias grandes, la corrección a la energía del sistema debido a la interacciones coulombianas entre celdas neutras es prácticamente despreciable (es una contribución que viene del desarrollo en multipolos) [109, 110]. Las oscilaciones a la frecuencia $2\Delta_0$ han sido observadas experimentalmente, en tiempo real, en Ref. [66] y justificadas teóricamente de modo satisfactorio despreciando las interacciones coulombianas. En lo que sigue, por simplicidad, nos concentraremos en perturbaciones que se aco-

plan a los modos de amplitud. No obstante, uno espera que una fenomenología similar (con oscilaciones de Rabi, etcétera) aparezca teniendo en cuenta perturbaciones Raman más generales que pueden acoplarse a fluctuaciones de carga entre celdas, donde las interacciones de Coulomb pueden tener algún efecto relevante.

4.1. Modelo

Nuestro primer objetivo ahora es el estudio de la respuesta superconductora, fuera de equilibrio, en presencia de una perturbación uniforme (todas la cuasipartículas sienten la misma fuerza) y periódica en el tiempo. Por simplicidad, y como venimos haciendo hasta ahora, consideraremos un superconductor BCS cuyo *gap* es isotrópico en el espacio \mathbf{k} (superconductor de onda s). De los formalismos usados hasta el momento, el más apropiado para el caso de perturbaciones periódicas en ausencia de relajación de energía, es el formalismo de pseudoespines de Anderson. En este caso el hamiltoniano viene dado por,

$$H = -2 \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}(t) S_{\mathbf{k}}^z - \lambda(t) \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \mathcal{W}} S_{\mathbf{k}}^+ S_{\mathbf{k}'}^-, \quad (4.1)$$

donde ahora además de la posibilidad de estímulo periódico en la interacción atractiva $\lambda(t)$ también es posible considerar que la estructura de banda, y como consecuencia la densidad de estados, cambia en el tiempo. En la Ec. (4.1) $\xi_{\mathbf{k}}(t) = \varepsilon_{\mathbf{k}}(t) - \mu$ donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}(t)$ es la energía de partícula libre y μ es el nivel de Fermi. Los estados \mathbf{k} que participan en la superconductividad son aquellos cuyas energías se encuentran en una banda de ancho $2\omega_D$ (dos veces la frecuencia de Debye) alrededor del nivel de Fermi lo cual ha sido representado en la segunda suma del lado derecho de la Ec. (4.1) por la región \mathcal{W} en el espacio \mathbf{k} que satisface dicho requerimiento. Debemos aclarar que si bien estudiaremos tanto el efecto de modulaciones en la interacción atractiva como de la densidad de estados, analizaremos los efectos que producen cada uno de ellos de forma separada. Las posibles realizaciones experimentales de dichas perturbaciones serán discutidas en la próxima sección.

Debido a que la interacción atractiva que hemos considerado en el segundo término de la Ec. (4.1) es de largo alcance en \mathbf{k} , la aproximación de campo medio es exacta en el límite termodinámico y las ecuaciones de movimiento para los pseudoespines discutida en el capítulo 2 describe la dinámica exacta del problema. Para el caso que nos ocupa ahora, el hamiltoniano BCS en campo medio viene dado por $H_{\text{MF}}(t) = - \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{S}_{\mathbf{k}}(t) \cdot \mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t)$ donde ahora el campo pseudomagnético es $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) = 2\Delta'(t) \hat{x} + 2\Delta''(t) \hat{y} + 2\xi_{\mathbf{k}}(t) \hat{z}$. La parte real e imaginaria del parámetro de

orden superconductor al tiempo t son definidos autoconsistentemente como

$$\Delta'(t) = \lambda(t)S_{tot}^x(t), \quad (4.2)$$

$$\Delta''(t) = \lambda(t)S_{tot}^y(t), \quad (4.3)$$

donde $S_{tot}^x(t) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \langle S_{\mathbf{k}}^x \rangle(t)$ y $S_{tot}^y(t) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \langle S_{\mathbf{k}}^y \rangle(t)$. Debemos recordar que la proyección x - y de los pseudoespines está relacionada con el parámetro de orden superconductor en tanto la componente z está asociada a las fluctuaciones de carga, lo cual será útil tener en mente para la discusión que sigue.

De la misma forma que en los análisis previos, y sin pérdida de generalidad tomaremos $\langle S_{\mathbf{k}}^y \rangle^0 = 0$ donde el supraíndice 0 indica el valor en equilibrio. Esto significa que fijamos la fase del superconductor de manera que el gap es real, lo cual se mantiene durante toda la evolución temporal. En equilibrio, en ausencia de excitaciones, los pseudoespines se alinean en la dirección de su campo local $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}^0 = 2\Delta_0 \hat{x} + 2\xi_{\mathbf{k}} \hat{z}$. De este modo, en el estado fundamental, a temperatura cero, la textura de pseudoespín viene dada por

$$\langle S_{\mathbf{k}}^x \rangle^0 = \frac{\Delta_0}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2}}, \quad \langle S_{\mathbf{k}}^z \rangle^0 = \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2}}. \quad (4.4)$$

y en presencia de las perturbaciones periódicas satisface la ecuación de movimiento usual para los momentos magnéticos en presencia de un campo magnético, obtenida en el capítulo 2,

$$\frac{d\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle}{dt} = -\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t) \times \langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (4.5)$$

Para el caso en el que el mecanismo de excitación es una DOS que cambia en el tiempo, es simple mostrar que perturbaciones en la energía de cuasipartícula $\varepsilon_{\mathbf{k}}(t)$, independientes del momento, son totalmente irrelevantes. Para mostrarlo, consideremos una excitación instantánea de la estructura de banda dada por

$$\varepsilon_{\mathbf{k}}(t) = \varepsilon_{\mathbf{k}}^0 + V\Delta t \delta(t), \quad (4.6)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}^0$ es la relación de dispersión en equilibrio y $V\Delta t$ es la magnitud del potencial impulsivo que se acopla con la carga total. Integrando la ecuación de movimiento [Ec. (4.5)] en un pequeño intervalo de tiempo dt , uno encuentra que inmediatamente después de la excitación, los pseudoespines obedecen la ecuación,

$$\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle(dt) = \langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle^0 - \hat{z} \times \langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle^0 V\Delta t \quad (4.7)$$

donde $\langle \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \rangle^0$ es el pseudoespín en equilibrio antes de la acción de la perturbación. Esto corresponde a una rotación global de todos los pseudoespines alrededor del eje

z en un mismo ángulo $\Delta\phi = -V\Delta t$ lo cual se traduce, a través de las Ecs. (4.2) y (4.3) en una rotación global del parámetro de orden en el mismo ángulo en el plano x - y . De esta forma, después de la perturbación, los pseudospines están en equilibrio todavía y la única consecuencia es un cambio de la fase global del superconductor. Para un superconductor aislado, tal cambio no tiene ninguna consecuencia física y puede ser eliminada usando una transformación de *gauge*. Este resultado apoya el análisis de dispersión Raman de la Ref. [111] que muestra que un operador Raman proporcional a la densidad total de carga no produce efecto alguno se considere o no interacciones de largo alcance. Como consecuencia, perturbaciones uniformes (independientes del momento) como la de la Ec. (4.6) no serán consideradas en lo que sigue. Por la misma razón, podemos considerar que μ es independiente del tiempo y corresponde al potencial químico de equilibrio. También por la misma razón, interacciones de Coulomb de largo alcance no juegan ningún papel relevante para esta clase de perturbaciones independientes del momento. Las interacciones de largo alcance podrían ser relevantes si uno considera perturbaciones que se acoplan con el operador densidad a momento finito lo cual está más allá de los objetivos de esta tesis. Nótese que para perturbaciones de momento total nulo el operador asociado a dicha perturbación es el operador de número lo cual conmuta con el hamiltoniano y no produce ningún efecto. En este caso, estamos suponiendo que tenemos un superconductor aislado con un número fijo de partículas y donde un cambio global de la fase superconductora es irrelevante.

4.2. Mecanismos de excitación periódica en el superconductor

En esta sección, discutiremos los posibles mecanismos que pueden ser usados para excitar periódicamente un superconductor y sacarlo del equilibrio. Contrario a la mayoría de los trabajos previos, en los que utilizan protocolos de cambio súbito en sistemas de átomos ultrafríos [48, 49, 51, 52, 112], en este capítulo consideraremos perturbaciones periódicas dependientes del tiempo que actúan durante un largo período de tiempo.

4.2.1. Modulación periódica de la DOS

Los estudios teóricos sobre el acoplamiento de fonones a los modos de amplitud espontáneo del parámetro de orden superconductor, comenzaron hace varias décadas atrás motivados en gran medida por resultados experimentales en 2H-NbSe₂ [102, 103, 113, 114]. En este material, aparece una onda de densidad de carga (CDW)

con una temperatura de ordenamiento $T_{\text{CDW}} = 33 \text{ }^\circ\text{K}$ mayor que la temperatura crítica superconductora, $T_c = 7 \text{ }^\circ\text{K}$. Dicha CDW, mediada por fonones Raman activos, abre parcialmente un *gap* en la superficie de Fermi de tal modo que la densidad de estados disponible para la superconductividad cambia. Como consecuencia, a bajas temperaturas, en la fase superconductora, la amplitud del parámetro de orden en equilibrio, es dependiente fuertemente de las coordenada de la red asociada a los fonones, la cual denotaremos en lo que sigue como u .

Debido a que los fonones que participan son activos Raman, estos pueden ser excitados con un pulso de luz corto con técnicas usuales de espectroscopía Raman [115, 116]. Considerando que el pulso de luz es aplicado a $t = 0$ y que el amortiguamiento de los modos colectivos de la red es despreciable en la escala de tiempo en la que estudiamos la dinámica superconductora, entonces podemos suponer que la coordenada asociada a dicho fonón viene dada por $u(t) = u_0 \Theta(t) \sin(\omega_d t)$ donde $\Theta(t)$ es la función escalón unitario de Heaviside y ω_d denota la frecuencia del fonón (en este caso la frecuencia de la perturbación periódica). Un primer modelo de modulación de la DOS puede ser considerar que la velocidad de Fermi cambia en el tiempo periódicamente, lo la cual corresponde a una dependencia temporal de la forma $\varepsilon_{\mathbf{k}}(t) = \varepsilon_{\mathbf{k}}^0[1 + \beta(t)]$ con $\beta(t) \propto u(t)$. Como discutimos anteriormente, los términos dinámicos que se acoplan con la densidad total son irrelevantes y por tanto uno puede añadir un término dependiente del tiempo, proporcional al potencial químico, tal que la perturbación relevante pueda ser escrita como

$$\xi_{\mathbf{k}}(t) = \xi_{\mathbf{k}}^0[1 + \beta(t)]. \quad (4.8)$$

Dicha perturbación, corresponde a un cambio en la DOS, $N(t) = N_0/[1 + \beta(t)]$ donde N_0 es la DOS en equilibrio. Estas ecuaciones sugieren que uno puede inducir oscilaciones periódicas en la DOS excitando fonones en dicho material, lo cual a su vez excita al superconductor. Es importante enfatizar lo siguiente: la ecuación del *gap* BCS en *equilibrio* termodinámico para un mecanismo de apareamiento entre electrones cuya frecuencia de corte es ω_D es

$$\Delta_0 = 2\omega_D e^{-\frac{1}{N_0\lambda}}, \quad (4.9)$$

lo cual sugiere que un cambio de la densidad de estados es equivalente a un cambio en la interacción atractiva λ y que el parámetro relevante es $N\lambda$. Sin embargo, para un problema *fuera de equilibrio* como el que nos interesa, cambiar λ o cambiar la DOS a través de la Ec. (4.8) son perturbaciones distintas que conllevan a respuestas dinámicas superconductoras estrictamente diferentes. Nótese además que, la modulación de la interacción atractiva representa un campo pseudomagnético oscilante

en la dirección x de los pseudospines mientras que la modulación periódica de la DOS representa un campo pseudomagnético alterno en la dirección z . No obstante, hemos encontrado que, para tiempos largos los resultados numéricos para uno u otro tipo de perturbación, son cualitativamente similares y la existencia de modos Rabi-Higgs y todas las consecuencias que derivan de ello, son visibles en ambos casos.

Otro tipo de excitaciones que puede dar lugar a una DOS dependiente del tiempo son la dispersión Raman estimulada impulsiva (ISRS) y el uso de radiación con frecuencias en el rango de los THz que discutiremos a continuación.

4.2.1.1. Dispersión Raman estimulada impulsiva (ISRS)

La forma en la que se transfiere la energía de un pulso de luz óptico a los electrones, fonones u otros modos colectivos depende fuertemente de la naturaleza del material en cuestión. En general, la luz (en el régimen cercano a los rayos ultravioletas, visible o cercano al infrarrojo) se acopla a los electrones de valencia del sólido y los fotoexcita en estados previamente desocupados. Dicha fotoexcitación puede generar una fuerza sobre la red del sólido, que puede ser una fuerza puramente impulsiva (tipo una delta de Dirac), una fuerza persistente en el tiempo (fuerza tipo un escalón) o una mezcla entre estos dos comportamientos límites. Para medios opacos (que absorben fácilmente la radiación) la excitación coherente de fonones en general se rige por el segundo tipo de fuerza. En este caso, los iones de la red se desplazan en u_0 de su posición de equilibrio en cierto instante de tiempo y comienzan a oscilar alrededor de su nuevo mínimo de potencial lo cual da lugar a una oscilación de la red tipo $\cos(u)$. Este mecanismo se conoce como mecanismo displasivo. Un comportamiento mucho más fácil de tratar teóricamente se corresponde con aquellos materiales que resultan transparentes a la radiación incidente. En este caso, la fuerza sobre las coordenadas fonónicas puede ser modelada como una delta de Dirac y las oscilaciones colectivas de la red son tipo $\sin(u)$ lo cual se conoce como mecanismo impulsivo. En este último caso, la radiación al pasar por el material lo polariza y le transfiere energía al sistema que es absorbida bien por los fonones [115], magnones [117] o por los grados de libertad asociados a las fluctuaciones de la densidad de carga del condensado de pares de Cooper [66] (ISRS de fonones, magnones o ISRS electrónico). En lo que sigue discutiremos el mecanismo impulsivo de excitación como candidato para lograr una perturbación periódica de la DOS.

En presencia de un campo eléctrico dependiente del tiempo $\mathbf{E}(t)$ de frecuencia ω , la densidad de energía electromagnética almacenada en un sólido polarizable

viene dado, según las ecuaciones de Maxwell al orden más bajo en el campo, por

$$U(t) = -\frac{1}{2} \mathbf{E}(t) \cdot \chi(\omega) \cdot \mathbf{E}(t), \quad (4.10)$$

donde estamos considerando que el campo eléctrico es uniforme (no depende de las coordenadas espaciales) lo cual es válido en el límite de longitud de onda larga (la dependencia del campo con la posición es suficientemente suave comparada con las dimensiones de la muestra). En este caso, $\chi(\omega)$ es la susceptibilidad dieléctrica del material que depende de la frecuencia de oscilación del campo eléctrico y de su polarización (por ejemplo, en x , y o z) por lo que en general es un tensor $\chi_{\mu\nu}(\omega)$. Para abreviar la notación y por razones que serán obvias en lo que sigue para el caso de Raman electrónico, escribiremos solamente $\chi(\omega)$. Dicha susceptibilidad cambia con las oscilaciones de la red (fonones) y si uno considera que el desplazamiento referido a la posición de equilibrio es pequeño, entonces desarrollando en serie de Taylor uno puede escribir

$$\chi(\omega) = \chi_0(\omega) + \frac{\partial \chi(\omega)}{\partial u} u. \quad (4.11)$$

De esta forma, se obtiene una corrección a la energía del sistema debido al segundo término de la Ec. (4.11). Si cuantizamos dicha energía obtenemos el hamiltoniano Raman

$$H_R(t) = -\frac{1}{2} \mathbf{E}(t) \cdot \frac{\partial \chi(\omega)}{\partial u} \cdot \mathbf{E}(t) \hat{u} = -F(t) \hat{u}$$

donde ahora \hat{u} representa el operador posición. La segunda igualdad enfatiza que dicho hamiltoniano puede entenderse cómo una fuerza $F(t)$ que actúa sobre las coordenadas del fonón. Este mismo tipo de análisis puede ser generalizado para el caso de Raman electrónico donde la susceptibilidad puede ser desarrollada a primer orden en la densidad de carga. Dicho mecanismo (ISRS electrónico) ha sido utilizado experimentalmente como una fuente de excitación para condensados superconductores [66, 104]. En este caso, el hamiltoniano total es $H = H_0 + H_R$ donde H_0 es el hamiltoniano BCS de equilibrio y H_R es el hamiltoniano Raman electrónico [66, 104], el cual viene dado por,

$$H_R(t) = \sum_X v_X(t) \hat{N}_X \quad (4.12)$$

donde

$$v_X(t) = -\frac{1}{2} \mathbf{E}(t) \cdot \frac{\partial \chi(\omega)}{\partial N_X} \cdot \mathbf{E}(t) \quad (4.13)$$

y $\partial \chi(\omega)/\partial N_X$ es un tensor en general (el tensor Raman) el cual puede ser desarrollado en las distintas representaciones irreducibles X correspondientes al grupo

puntual de simetría de la red a la que pertenezca el material que se desee estudiar y cuyas funciones base son $f_{\mathbf{k}}^X$ (factores de forma). El operador $\hat{N}_X = \sum_{\mathbf{k}\sigma} f_{\mathbf{k}}^X c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$ en este caso es el operador de carga en las distintas simetrías. La descripción en términos del campo eléctrico (en lugar de usar el potencial vector como en la siguiente sección) resalta la relación de este modo de excitación con las propiedades ópticas del material a la energía del *pump*, $\hbar\omega$.

Si nos concentramos en materiales con simetría tetragonal (cupratos por ejemplo), las funciones base de las representaciones irreducibles del grupo puntual son

$$\begin{aligned} f_{\mathbf{k}}^{A_{1g}} &= \frac{1}{2} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)], \\ f_{\mathbf{k}}^{B_{1g}} &= \frac{1}{2} [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)], \\ f_{\mathbf{k}}^{B_{2g}} &= \sin(k_x a) \sin(k_y a). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Nótese que no hemos incluido $f_{\mathbf{k}}^{A_{1g}} = 1$ dado que esto conlleva a una perturbación de la densidad de carga total lo cual es irrelevante por las razones expuestas anteriormente. La Ec. (4.12) y Ec. (4.13) muestran que el campo eléctrico actúa como un potencial dependiente del tiempo acoplado a las excitaciones de carga en las distintas simetrías del sistema. Usualmente pulsos de campo electromagnético cuya duración se encuentra en el rango de los 50 fs con frecuencia en el rango de infrarrojo (IR) o incluso el visible son empleados en este tipo de técnicas. B. Mansart y colaboradores han demostrado experimentalmente [66] que pulsos de estas características inducen fluctuaciones en el condensado superconductor con una frecuencia cercana a 2Δ gracias al mecanismo de ISRS electrónico.

Las fluctuaciones de carga producidas después de la acción del pulso decaen rápidamente debido al desfase de las excitaciones con distintas frecuencias. Sin embargo, como se menciona en la Ref. [104], uno puede excitar el material con una secuencia periódica de pulsos tal que las excitaciones cuya energía coincide con la periodicidad de dicha perturbación son reforzadas mientras que las otras son suprimidas. De este modo uno lograría una perturbación periódica que se acopla con la carga lo cual es equivalente a una modulación de la DOS como en la sección anterior. Una ventaja de este método es que es muy fácil detectar la respuesta del condensado modificando las propiedades ópticas del sistema usando frecuencias ópticas o “cualquier” otra alta frecuencia [66, 104]. La clave es buscar una frecuencia de excitación en la que el superconductor sea lo más transparente posible y de esta forma garantizar menor absorción y por ende menos calentamiento.

Las reglas de selección para ISRS son similares a las de la dispersión Raman espontánea, excepto que en ISRS la v_X involucra la misma polarización del campo eléctrico a ambos lados del tensor Raman en la Ec. (4.13) mientras que en el Raman

espontáneo los campos eléctricos a izquierda y derecha del tensor Raman están relacionados con los fotones entrantes y salientes. Por lo tanto, en la notación de la Tabla I de la Ref. [118], las polarizaciones xx , yy y $x'x'$ son accesibles en ISRS mientras que la xy no. En este caso el tensor Raman es esencialmente una matriz diagonal y es una de las razones por lo que introducimos la susceptibilidad dieléctrica y el tensor Raman sin subíndices $\mu\nu$. Estas polarizaciones "paralelas" excitan los modos de simetría A_{1g} junto con otros modos. Por simetría, y usando los mismos argumentos que antes, la parte A_{1g} de la perturbación se puede llevar a la forma de la ecuación que modula la DOS Eq. (4.8) mientras que los otros términos, con estructura más complicada a lo largo de la superficie de Fermi, son menos dominantes. En particular, para un modelo de red cuadrada con saltos a primeros vecinos la función base A_{1g} es proporcional a la relación de dispersión y de ahí sale directamente que el hamiltoniano Raman actúa como una modulación de la DOS. Por simplicidad, en nuestras simulaciones nos concentramos en modos que preservan la simetría de la red. No obstante uno espera que los resultados físicos más relevantes (Rabi-Higgs, etcétera) puedan ser observados en el caso que se exciten modos de más baja simetría lo cual quedará más claro cuando discutamos el origen del modo Rabi-Higgs. La excitación de dicho modo parece ser un fenómeno robusto que necesita pocos requerimientos para que pueda ser observado de modo transitorio en la dinámica fuera de equilibrio de un superconductor en presencia de una radiación de alta frecuencia ($\omega > 2\Delta_0$).

4.2.1.2. Radiación en el rango de los THz

Recientemente, Matsunaga y colaboradores han demostrado experimentalmente [11, 12] que los pulsos de radiación en el rango de los THz pueden producir oscilaciones del condensado superconductor. En el análisis de sus resultados, ellos suponen que el campo eléctrico en el THz se acopla directamente al modo de amplitud del *gap* superconductor (modo de Higgs). Sin embargo, esta interpretación ha sido cuestionada por Cea, Castellani y Benfatto [56] quienes argumentan que la respuesta está dominada por fluctuaciones de carga, similares a las del experimento Raman transitorio de B. Mansart y colaboradores [66].

En este caso, para tener en cuenta el acoplamiento de los electrones con el campo electromagnético se utiliza la sustitución de Peierls. Para portadores con carga q ($= -|e|$ para electrones) en el modelo de red subyacente esto es,

$$c_{i+\mathbf{r}}^\dagger c_i \rightarrow c_{i+\mathbf{r}}^\dagger c_i e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{r}}, \quad (4.15)$$

donde $\mathbf{a} \equiv q\mathbf{A}/(\hbar c)$ y el potencial vector \mathbf{A} no depende de las coordenadas espaciales (límite de longitud de onda larga). Como consecuencia, el campo eléctrico viene

dado por $\mathbf{E} = -\dot{\mathbf{A}}/c$.

Expandiendo hasta segundo orden en el potencial vector, el hamiltoniano viene dado por $H = H_0 + H_T$ con

$$H_T = -2 \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}^0}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{a}(t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{k}}^0}{\partial \mathbf{k}_\mu \partial \mathbf{k}_\nu} a_\mu(t) a_\nu(t) \right) S_{\mathbf{k}}^z, \quad (4.16)$$

donde la suma sobre índices repetidos es implícita y H_0 es el hamiltoniano BCS en equilibrio. El primer término dentro del paréntesis de la Ec. (4.16) representa el acoplamiento del potencial vector a la parte paramagnética de la corriente. Consideremos $\mathbf{A}(t) = \bar{\mathbf{A}} \Theta(t) \sin(\omega_T t)$. Para $\omega_T < 2\Delta$ y en presencia de un desorden no muy fuerte, no hay absorción de la parte paramagnética (la parte real de la conductividad óptica es cero) y no hay transferencia de energía entre el campo electromagnético y el sistema. Como estamos interesados en procesos en los que la perturbación y el sistema intercambian energía, consideraremos solo el segundo término. Esto se comporta como una perturbación periódica con una dependencia temporal $\sim \cos(2\omega_T t)$. Si consideramos un sistema con las mismas simetrías que analizamos en la sección anterior (simetría tetragonal) y una polarización del campo eléctrico $x'x'$ de modo que $\bar{A}_x = \bar{A}_y$, obtenemos nuevamente una perturbación cuya dependencia con el momento tiene la misma simetría que la relación de dispersión para el caso de una red cuadrada con saltos solo a primeros vecinos lo cual se traduce en una perturbación dependiente del tiempo de la DOS a través de la Ec. (4.8). Una posible ventaja de este mecanismo es que siendo $\omega_T < 2\Delta$ uno evita, al menos a primer orden, la posibilidad de calentamiento en la muestra. Si bien en este caso la frecuencia de la excitación (*pump*) está por debajo de 2Δ el pulso posterior (*probe*), que sensa las excitaciones provocadas por el *pump*, es conveniente que esté en el rango de las frecuencias ópticas con el objetivo de conseguir una alta resolución temporal.

4.2.2. Oscilaciones de la interacción atractiva mediada por fonones

Hasta ahora discutimos algunos mecanismos que podrían modular la DOS en el tiempo. Otro tipo de perturbación periódica que puede estimular al superconductor es la modulación de la interacción atractiva. En esta sección proponemos un mecanismo mediante el cual se puede obtener una dependencia temporal $\lambda(t)$ mediada por fonones, en superconductores no convencionales, en particular en superconductores basados en Fe.

Una recopilación de varios experimentos en diferentes materiales de la familia de superconductores basados en Fe [119–123] muestra que la temperatura crítica (y por lo tanto la energía de condensación) es muy sensible a la altura del anión medida desde el plano en el que se encuentran los átomos de Fe, en particular en el FeSe (ver

Apéndice A1). Conclusiones similares pueden ser extraídas de los experimentos de microscopía túnel de barrido [124] y las mediciones de profundidad de penetración magnética [125].

Teóricamente [126–131] en estos materiales se encuentra que el *magnetismo* es muy sensible a la altura del anión. Esto puede explicarse naturalmente si el sistema está cerca de una inestabilidad de Stoner controlada por este último parámetro. Además, aunque el origen de la superconductividad en este tipo de materiales es un tema de discusión actual, hay un gran consenso de que podría deberse a las fluctuaciones magnéticas y que la interacción atractiva está controlada por la susceptibilidad magnética de dichos compuestos [132, 133]. Por lo tanto, es bastante natural atribuir una gran fracción (si no toda) de la sensibilidad que presenta la T_c con la altura del anión, a una modulación de la interacción atractiva a través de la susceptibilidad magnética.

Otra característica que hace que los materiales basados en Fe sean particularmente adecuados para nuestra propuesta, es que prácticamente en todos estos materiales hay un modo fonónico de simetría A_{1g} que involucra la coordenada de la altura del anión. Este modo se puede excitar en tiempo real en experimentos de *pump-probe* mediante un proceso Raman estimulado [104, 115, 116].

Dicho esto, consideraremos un modelo en el que la interacción atractiva es una función de la altura del anión que puede manipularse con un pulso láser. Hemos estimado que los cambios en λ son menores al 10 % para el caso del FeSe (ver Apéndice A1). A continuación estudiamos modulaciones de λ hasta de un 10 % de su valor de equilibrio de forma ilustrativa, aunque nuestros principales resultados son robustos y visibles para valores mucho más pequeños de la modulación de la interacción. Consideraremos entonces que,

$$\lambda(t) = \lambda_0 + \frac{d\lambda}{du}u(t) = \lambda_0[1 + \Theta(t) \alpha \sin(\omega_d t)], \quad (4.17)$$

donde $\alpha \in [0, 0.1]$.

4.2.3. Perturbaciones periódicas en átomos ultrafríos

La manipulación precisa de los parámetros del hamiltoniano en átomos ultrafríos es una de las ventajas más conocidas en este tipo de sistemas [101] y, por lo tanto, en principio, tanto un $\lambda(t)$ como una dependencia temporal de la DOS podrían ser implementados sin mayores complicaciones.

La interacción entre fermiones puede controlarse mediante un campo magnético dependiente del tiempo que modula una resonancia de Feshbach [100] o mediante un control óptico lo cual es un método mucho más rápido [134].

Para modular la DOS, el protocolo de control más sencillo es cambiar periódicamente en el tiempo la profundidad de los pozos de potencial de la red óptica en la que se mueven los fermiones [101]. Este protocolo ya ha sido implementado satisfactoriamente para sistemas bosónicos [135–137]. El cambio en la profundidad del pozo modifica la probabilidad de salto de los fermiones entre un sitio y otro y como consecuencia la DOS depende del tiempo.

Finalmente debemos mencionar que, recientemente, en Ref. [138] se ha introducido una nueva forma de modular el parámetro de orden superconductor experimentalmente en un gas de fermiones fuertemente interactuante, lo cual parece adecuado para estudiar nuestra propuesta teórica en un contexto más amplio. En este caso, utilizan tres estados fermiónicos y estudian cómo responde la superconductividad que surge de dos de sus estados, acoplados a un tercer estado que sirve para excitar al sistema total. Con este método consiguen generar oscilaciones de Rabi entre uno de los dos estados fermiónicos que participan en la superconductividad y un tercer estado y estudian el modo de amplitud del *gap* superconductor (modo de Higgs) en el tiempo.

4.3. Respuesta lineal

Después de una discusión minuciosa de los posibles mecanismos de excitación para obtener un $\lambda(t)$ o una dependencia temporal en la DOS, veamos sus efectos en la dinámica del *gap*. Como hemos mencionado antes y como demostraremos numéricamente en la próxima sección, si bien la respuesta dinámica superconductora ante una modulación periódica de la DOS es estrictamente diferente a la respuesta en presencia de una modulación de la interacción atractiva $\lambda(t)$, los resultados físicos más relevantes son muy similares. Es por ello que nos concentraremos en el estudio de la respuesta superconductora ante un estímulo en la interacción atractiva $\lambda(t)$.

Como un primer ejercicio calculamos la respuesta lineal del superconductor ante una perturbación periódica $\lambda(t)$ que se prende adiabáticamente desde $t = -\infty$. En lo que sigue utilizamos un supraíndice “1” para las correcciones que son lineales en la perturbación y así distinguirlas de las cantidades en equilibrio que se denotan con un supraíndice “0”. De esta forma, $\mathbf{b}_k = \mathbf{b}_k^0 + \mathbf{b}_k^1 \exp[i(\omega - i\delta)t]$, $\lambda = \lambda_0 + \lambda_1 \exp[i(\omega - i\delta)t]$ con $\lambda_1 = \alpha\lambda_0$ y $\mathbf{S}_k(t) = \mathbf{S}_k^0 + \mathbf{S}_k^1 \exp[i(\omega - i\delta)t]$ donde δ es una cantidad positiva e infinitesimal. Después de linealizar las Ecs. de movimiento [Ec. (4.5)] se obtiene

$$i\omega \mathbf{S}_k^1 = -\mathbf{b}_k^1 \times \mathbf{S}_k^0 - \mathbf{b}_k^0 \times \mathbf{S}_k^1, \quad (4.18)$$

cuya solución viene dada por

$$S_k^1 = \frac{b_k^{1x} \xi_k}{2\sqrt{\Delta_0^2 + \xi_k^2} ((\omega - i\delta)^2 - 4(\Delta_0^2 + \xi_k^2))} \begin{pmatrix} -2\xi_k \\ -i\omega \\ 2\Delta_0 \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Note que dado que estamos considerando superconductores de onda s la componente x del campo pseudomagnético no depende del momento ($b_k^{1x} \equiv b^{1x}$). Por tanto, considerando que la DOS tiene simetría electrón-hueco la única componente no nula, después de sumar en k en ambos miembros de la Ec. (4.19), es la componente x que puede escribirse como

$$S_{tot}^{1x} = \chi_{\Delta,\Delta}^0(\omega) b^{1x}, \quad (4.20)$$

donde se ha introducido la susceptibilidad

$$\chi_{\Delta,\Delta}^0(\omega) = - \sum_k \frac{\xi_k^2}{\sqrt{\Delta_0^2 + \xi_k^2} ((\omega - i\delta)^2 - 4(\Delta_0^2 + \xi_k^2))}. \quad (4.21)$$

La parte imaginaria de la Ec. (4.21) es

$$\text{Im}(\chi_{\Delta,\Delta}^0(\omega)) = -\text{signo}(\omega) \frac{\pi\rho}{4} \sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta_0}{\omega}\right)^2}, \quad (4.22)$$

para $2\Delta_0 < |\omega| < \omega_D$ y cero fuera de este intervalo de energía. La parte real puede obtenerse usando las relaciones de Kramers-Kroning. Esto es

$$\text{Re}(\chi_{\Delta,\Delta}^0(\omega)) = \frac{1}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im}(\chi_{\Delta,\Delta}^0(\omega'))}{\omega' - \omega} d\omega' \quad (4.23)$$

donde \mathcal{P} denota el valor principal de la integral. Por otro lado, podemos escribir

$$b^{1x}(t) = 2\Delta_1(t) = 2(\lambda_1(t)S_{tot}^{0x} + \lambda_0 S_{tot}^{1x}(t)), \quad (4.24)$$

y usando la Ec. (4.20) obtenemos que la respuesta de los pseudoespines a una frecuencia positiva ω es

$$S_{tot}^{1x}(t) = \alpha \chi_{\Delta,\Delta}(\omega) S_{tot}^{0x} e^{i\omega t}, \quad (4.25)$$

donde hemos definido una nueva susceptibilidad dada por

$$\chi_{\Delta,\Delta}(\omega) \equiv \frac{2\lambda_0 \chi_{\Delta,\Delta}^0(\omega)}{1 - 2\lambda_0 \chi_{\Delta,\Delta}^0(\omega)}. \quad (4.26)$$

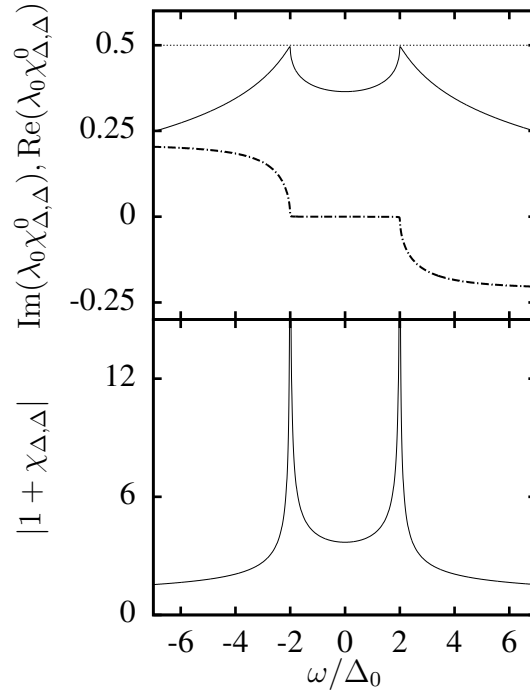


Figura 4.1: En el panel superior se muestra la parte real e imaginaria de la susceptibilidad Ec. (4.23) y Ec. (4.22) multiplicadas por λ_0 en línea continua y línea discontinua-punteada respectivamente. La línea discontinua horizontal muestra que la ecuación $1 - 2\lambda_0\chi_{\Delta,\Delta}^0(\omega) = 0$ se satisface para $\omega = 2\Delta_0$. En el panel inferior se muestra la función que determina la amplitud de las oscilaciones del parámetro de orden superconductor debido a la excitación $\lambda(t)$. En este caso usamos una frecuencia de corte $\omega_D = 20\Delta_0$.

Sumando la respuesta para $\pm\omega$ y tomando la parte real, obtenemos que la corrección a la amplitud del *gap* superconductor Δ_1 inducida por una perturbación periódica $\sim \cos(\omega t)$ es

$$\Delta_1 = \alpha |1 + \chi_{\Delta,\Delta}(\omega)| \Delta_0, \quad (4.27)$$

donde hemos usado el hecho de que $\Delta_0 = \lambda_0 S_{tot}^{0x}$.

En la Fig. 4.1 se muestra la parte real e imaginaria de la función $\chi_{\Delta,\Delta}^0(\omega)$. Es fácil mostrar [139] que la parte real del denominador de la Ec. (4.26) tiene un polo en $\omega = 2\Delta_0$ lo cual resulta evidente mirando la figura. Esto produce la conocida resonancia de Higgs en $\chi_{\Delta,\Delta}$ la cual ha sido estudiada en el contexto de la dispersión Raman [114], en el contexto de experimentos de *pump & probe* en el THz [11, 54] y en átomos ultrafríos [138]. En la figura también se ha graficado $|1 + \chi_{\Delta,\Delta}(\omega)|$ lo cual muestra un comportamiento resonante y determina la amplitud de la oscilación del parámetro de orden superconductor en presencia de una perturbación periódica según la Ec. (4.27). En lo que sigue mostraremos que, más allá del régimen de respuesta lineal, incluso lejos de la resonancia de Higgs, aparecen efectos no lineales interesantes.

La parte imaginaria de $\chi_{\Delta,\Delta}$ describe la transferencia de energía desde el campo oscilante hacia el sistema. La validez de las ecuaciones utilizadas en esta sección, requiere que la perturbación sea pequeña y también que los tiempos no sean dema-

siado largos. De hecho, para tiempos largos uno debería estudiar cómo la energía que inyecta el estímulo externo se distribuye en el sistema o cómo se transfiere a un reservorio externo. En un sistema cerrado (por ejemplo, un sistema de átomos ultrafríos en primera aproximación), en presencia de una perturbación periódica, uno puede pensar que se absorbe energía indefinidamente del campo externo y que a tiempos largos el sistema alcanza un estado de temperatura infinita. Sin embargo, como mostraremos a continuación, incluso en el régimen de perturbaciones grandes y respuesta fuertemente no lineal, esto no ocurre, un hecho que puede atribuirse a la integrabilidad del modelo [140]. En un sistema abierto en contacto con un baño térmico, uno espera que la energía se transfiera al baño. No obstante, a bajas temperaturas, los tiempos de relajación en los superconductores pueden ser muy largos [98] dejando una gran ventana temporal donde el sistema se comporta efectivamente como si fuera cerrado.

4.4. Respuesta no lineal y modos Rabi-Higgs

En esta sección estudiamos el comportamiento del sistema (dinámica $\Delta(t)$) cuando la perturbación periódica actúa durante largos intervalos de tiempo y/o la amplitud de la perturbación no es suficientemente pequeña, de modo que estamos en un régimen que va más allá de respuesta lineal.

4.4.1. Resultados numéricos

En nuestros cálculos, para $t \leq 0$ el sistema está en equilibrio. En este caso, el *gap* superconductor es Δ_0 el cual se considera real sin pérdida de generalidad en tanto la textura de pseudospín viene dada por la Ec. (4.4). A $t > 0$, comienza a actuar la perturbación periódica de acuerdo con la Ec. (4.8) y los pseudospines evolucionan según la Ec. (4.5), lo cual a su vez modifica el *gap* superconductor $\Delta(t)$ y los campos locales $b_k(t)$. En este capítulo, consideramos un conjunto de N pseudospines uniformemente espaciados en ξ_k dentro de una banda de ancho $\mathcal{W} = 40\Delta_0 = 2\omega_D$ lo cual equivale al doble de la frecuencia de corte (frecuencia de Debye ω_D , para superconductores convencionales). Al igual que en el capítulo 2, usamos el método de Runge-Kutta de cuarto orden para integrar numéricamente las ecuaciones de movimiento de los pseudospines con $N = 4 \times 10^4$. Si el parámetro de orden inicial es real (una elección de *gauge*), entonces la simetría del problema obliga a que continúe siendo real en todo momento tanto para el caso de un $\lambda(t)$ como en el de una DOS periódica en el tiempo. Es por ello que, la Ec. (4.3) es igual a cero a lo largo de toda la evolución temporal.

Hasta el momento nos hemos restringido al hecho de que la amplitud de la perturbación periódica ($\alpha\lambda_0$ para el caso de la modulación de la interacción atractiva) es una constante que no cambia en el tiempo. En el caso en el que dicha perturbación es asistida por fonones, esto puede parecer poco realista ya que los modos colectivos de la red (fonones), excitados con un pulso de luz corto, se amortiguan al transcurrir el tiempo. Más aún en el estado superconductor donde la energía puede transferirse del fonón a los pares de Cooper. Sin embargo, en los experimentos esto se puede contrarestar aplicando pulsos periódicamente con una periodicidad que sea múltiplo del período de los fonones con el objetivo de restaurar la oscilación de la red y lograr la amplitud original. Obviamente, en el caso de los átomos ultrafríos, ISRS electrónico o *pump & probe* en el THz esto no es un problema pues la amplitud de la perturbación se controla externamente.

A continuación presentamos los resultados para una modulación periódica de la interacción atractiva $\lambda(t)$ dada por la Ec. (4.17). Utilizamos parámetros adecuados para la versión asistida por fonones en materiales tales como el FeSe. Resultados cualitativamente equivalentes pueden ser obtenidos usando otros parámetros o considerando el caso de una DOS periódica en el tiempo.

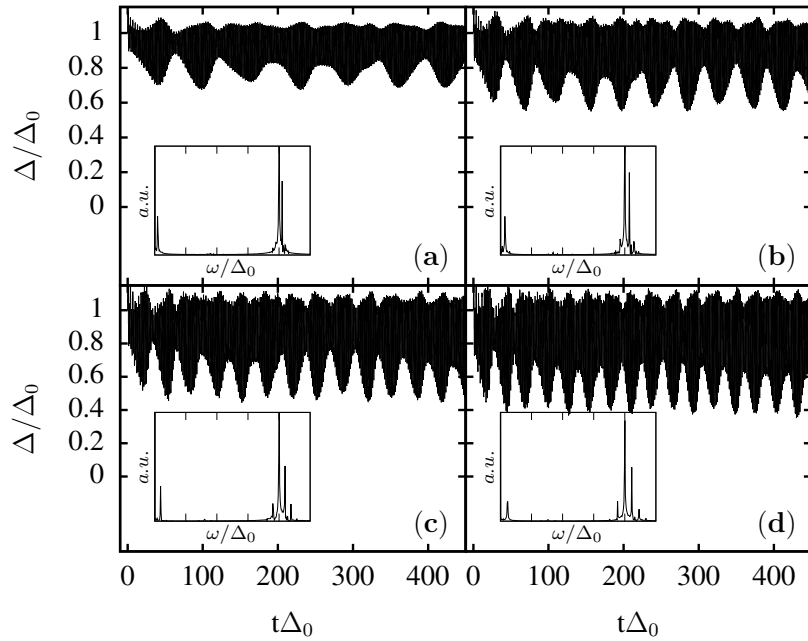


Figura 4.2: Dependencia temporal del parámetro de orden superconductor para $\alpha = 0.04$ (a), $\alpha = 0.06$ (b), $\alpha = 0.08$ (c) y $\alpha = 0.1$ (d). Las respectivas transformadas de Fourier de la dinámica $\Delta(t)$ se muestran en cada inset. Dos frecuencias fundamentales aparecen en el espectro. Una que corresponde a la frecuencia de la perturbación $\omega_d = 4\Delta_0$ y otra frecuencia más baja ω_R . También se observan picos satélites a las frecuencias $\omega_d \pm n\omega_R$ con $n = 1, 2, 3$.

La dinámica $\Delta(t)$ se muestra en la Fig. 4.2 para $\omega_d = 4\Delta_0$ y varios valores de α . La primera cosa a notar es que a pesar de que la perturbación puede dar energía al superconductor indefinidamente, el parámetro de orden promedio disminuye con

respecto a su valor de equilibrio pero no se suprime por completo, es decir, el sistema no tiende a un estado de temperatura infinita.

En la Figura 4.2 (y la Fig. 4.4 a continuación), la frecuencia de la perturbación corresponde a una oscilación que es demasiado rápida (que no se logra resolver en la escala de la figura) y da lugar a las regiones negras que parecen un continuo. Esencialmente, el sistema se sincroniza con el estímulo externo. Ambas características; sincronización y ausencia de calentamiento aparecen debido a que el sistema es integrable [140]. Además de estas oscilaciones rápidas, la amplitud del *gap* superconductor muestra oscilaciones lentas. Este nuevo modo no lineal de baja frecuencia es nuestro principal resultado el cual hemos denominado modo Rabi-Higgs por razones que quedarán claras en la siguiente sección (esencialmente es un modo de amplitud del *gap*, por eso Higgs, y que está relacionado con una oscilación de Rabi de las cuasipartículas en resonancia con la perturbación).

No obstante, es importante notar que estos nuevos modos de oscilación inducidos son muy diferentes de los modos espontáneos de Higgs reportados previamente en la literatura [48, 49, 51] los cuales tienen una frecuencia diferente (2Δ) y no muestran igual sensibilidad a la perturbación externa.

Para obtener más información sobre las oscilaciones del *gap* superconductor, realizamos un análisis de Fourier de la dinámica del parámetro de orden lo cual se muestra en las pequeñas figuras insertadas dentro la Fig. 4.2. Para todos los valores de α estudiados hay dos frecuencias fundamentales en la respuesta dinámica $\Delta(t)$. La primera es la frecuencia de la perturbación periódica ω_d y la segunda corresponde a la frecuencia de Rabi-Higgs ω_R cuyo período $\tau = 2\pi/\omega_R$ disminuye al aumentar α . Además, se pueden observar picos satélites a las frecuencias $\omega_d \pm n\omega_R$, donde n es un número entero pequeño.

Ahora analizaremos la amplitud de las oscilaciones del parámetro de orden superconductor a la frecuencia ω_d . Debido a la aparición de este nuevo modo Rabi-Higgs, la amplitud de las oscilaciones (alrededor de algún valor medio) no es una constante sino que presenta una modulación lenta que es claramente visible en la Fig. 4.2. Para caracterizar este efecto (oscilaciones de Rabi), definimos una amplitud, dependiente del tiempo, en cada intervalo $[t, t + 2\pi/\omega_d]$. El mínimo y el máximo de dicha amplitud efectiva, durante el estado estacionario de la dinámica, se denota como Δ_1^{\min} y Δ_1^{\max} respectivamente. En la práctica, estos valores no son otra cosa que los anchos mínimo y máximo de las regiones negras en la Fig. 4.2 para tiempos largos. La Fig. 4.3 muestra dichas amplitudes como función de la amplitud de la perturbación α . La línea continua corresponde al resultado analítico obtenido usando respuesta lineal dado por la Ec. (4.27) para $\omega = \omega_d$. Notablemente, vemos que dicha aproximación predice el orden de magnitud correcto de Δ_1 y está muy cerca de Δ_1^{\min} . Es decir, la respuesta lineal al menos fija el orden de magnitud de la amplitud de las

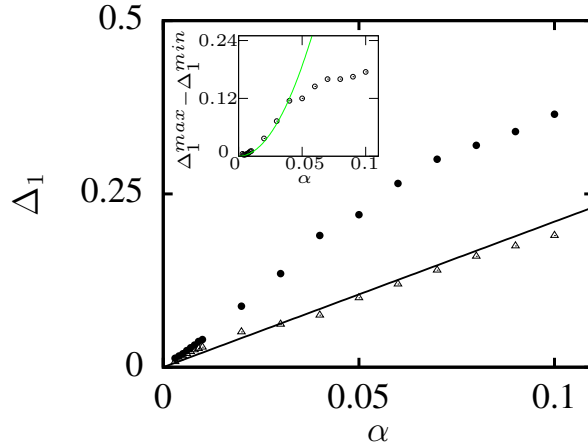


Figura 4.3: Amplitud de las oscilaciones del parámetro de orden superconductor como función de la amplitud de la perturbación. Para la definición de la amplitud mínima (triángulos) y máxima (círculos llenos) ver el texto. La línea continua es el resultado extraído del análisis de respuesta lineal [Ec. (4.27) para $\omega = \omega_d$]. La pequeña figura insertada muestra la diferencia entre la dos amplitudes para valores chicos de α . Los círculos vacíos son sacados de la simulación numérica en tanto la línea verde es un ajuste cuadrático.

oscilaciones del *gap* a la frecuencia de la perturbación aun lejos de su rango estricto de validez (pequeños valores α y tiempos cortos). No obstante, la respuesta lineal no puede explicar la diferencia entre Δ_I^{\min} y Δ_I^{\max} , lo cual es un efecto intrínsecamente no lineal. De hecho, tal diferencia está asociada con la aparición de la nueva frecuencia de oscilación que es claramente un efecto que va más allá del régimen de respuesta lineal. Esto también se puede ver en la pequeña figura insertada dentro de la Fig. 4.3 donde queda claro, a partir de los resultados numéricos, que para pequeños valores de α , la diferencia entre las dos amplitudes es aproximadamente cuadrática en α .

Existe un pequeño desajuste de la pendiente para α pequeño comparando la simulación numérica con lo que predice respuesta lineal. Sin embargo, esto era de esperar, ya que no estamos estrictamente en las condiciones de validez de dicha aproximación, pues el cambio de la interacción atractiva no fue prendido adiabáticamente para la simulación numérica y la amplitudes de oscilación del *gap* son sacadas del estado estacionario y no para tiempos cortos. Lo que es importante destacar y lo cual será de utilidad para escribir un resultado analítico aproximado para ω_R , es que el orden de magnitud que predice esta aproximación es razonable y coincide bastante bien con la solución exacta. Como comprobación adicional de que la magnitud de las amplitudes está bien descrita por la susceptibilidad dada en respuesta lineal, hemos realizado otras simulaciones numéricas cambiando la frecuencia de la perturbación periódica acercándonos a la resonancia de Higgs que se observa en la Fig. 4.1. Como era de esperar, en la medida que $\omega_d \rightarrow 2\Delta_0$ la amplitud de la respuesta superconductora aumenta como se muestra en la Fig. 4.4.

En el resto de este trabajo, presentaremos resultados numéricos solamente para

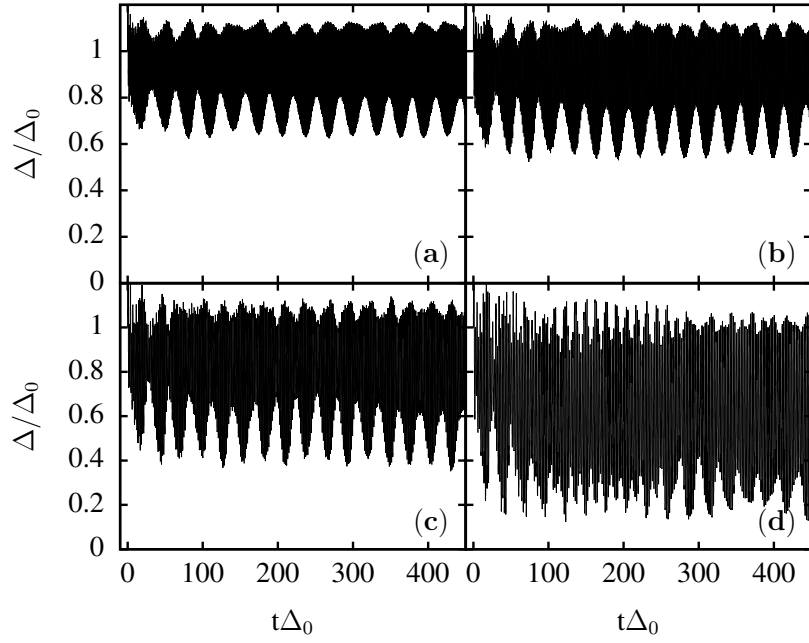


Figura 4.4: Evolución temporal del parámetro de orden superconductor para $\omega_d = 6\Delta_0$ (a), $\omega_d = 5\Delta_0$ (b), $\omega_d = 4\Delta_0$ (c) y $\omega_d = 3\Delta_0$ (d) con $\alpha = 0.1$. La amplitud de oscilación del *gap* aumenta en la medida que $\omega_d \rightarrow 2\Delta_0$.

$\omega_d = 4\Delta_0$ aunque resultados equivalentes tienen lugar siempre que $\omega_d > 2\Delta_0$.

4.4.2. Analogía con los experimentos de NMR

Hasta donde sabemos, el modo Rabi-Higgs encontrado en este trabajo, como respuesta dinámica del superconductor a perturbaciones periódicas dependientes del tiempo no ha sido reportado previamente. Este nuevo modo no lineal de oscilación, tiene su origen en un fenómeno resonante para los pseudoespines, análogo a las oscilaciones de Rabi en experimentos de NMR para espines magnéticos usuales, como demostraremos a continuación.

En presencia de un campo magnético estático B_0 , cualquier espín o momento magnético precesa con la frecuencia de Larmor ω_L proporcional a B_0 . Si se aplica un pequeño campo magnético alterno de amplitud B_1 con una frecuencia $\omega = \omega_L$ en un plano perpendicular a B_0 , el espín experimenta oscilaciones de Rabi con una nueva frecuencia que es proporcional a B_1 [141] y viene dada por

$$\omega_R = \gamma B_1, \quad (4.28)$$

donde γ es el factor giromagnético.

En el caso de los pseudoespines, para el pseudoespín correspondiente a ξ_k , el campo magnético estático viene dado por $\mathbf{b}_k = 2(\Delta_0, 0, \xi_k)$ y como consecuencia la frecuencia de Larmor es, $\omega_L = 2\sqrt{\xi_k^2 + \Delta_0^2}$. Esto no es otra cosa que la energía

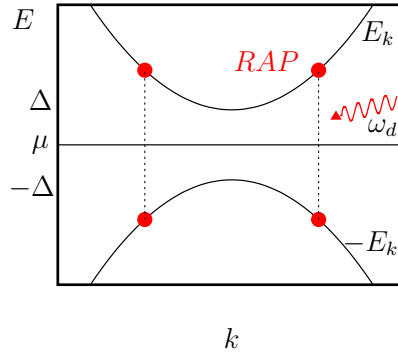


Figura 4.5: Esquema del mecanismo de excitación. La perturbación periódica de ω_d entra en resonancia con un conjunto finito de cuasipartículas que tienen energía cercanas a $\pm E_k = \pm \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_0^2}$. El conjunto de RAP ha sido indicado con puntos rojos en este caso unidimensional y corresponde a una línea en el caso de un superconductor bidimensional.

necesaria para crear un par de cuasipartículas como se muestra esquemáticamente en la Fig. 4.5. Existe entonces, una familia de pseudoespines, denotados por $\mathbf{S}_{\mathbf{k}_r}$, para los cuales se satisface la condición de resonancia

$$\omega_d = 2\sqrt{\xi_{\mathbf{k}_r}^2 + \Delta_0^2}. \quad (4.29)$$

En lo que sigue, nos referiremos a este conjunto de pseudoespines como Pseudoespines de Anderson Resonantes (RAP: por sus iniciales en inglés). El campo pseudomagnético oscilante que actúa sobre el conjunto de RAP es

$$\mathbf{b}_{\mathbf{k}_r}(t) = 2(\Delta(t), 0, \xi_{\mathbf{k}_r}). \quad (4.30)$$

En primera aproximación, consideremos que la dependencia temporal del campo viene dada por

$$\Delta(t) = \bar{\Delta} + \Delta_1 \cos(\omega_d t), \quad (4.31)$$

donde $\bar{\Delta}$ es el valor promedio del parámetro de orden en el estado estacionario (similar pero no necesariamente igual a Δ_0) y Δ_1 es una amplitud de oscilación constante y cuya magnitud puede ser aproximada usando el método de respuesta lineal. Ahora descomponemos la parte dependiente del tiempo del campo pseudomagnético (lo cual está orientado a lo largo del eje x) en un componente paralelo al campo estático $\mathbf{b}_{\mathbf{k}_r}(0) = 2(\Delta_0, 0, \xi_{\mathbf{k}_r})$ y otro componente perpendicular a él. La componente perpendicular viene dada por

$$b_{\mathbf{k}_r}^\perp(t) = 2\Delta_1 \cos(\omega_d t) \sqrt{1 - \left(\frac{2\bar{\Delta}}{\omega_d}\right)^2}. \quad (4.32)$$

De acuerdo con la Ec. (4.28), dicho campo magnético dependiente del tiempo

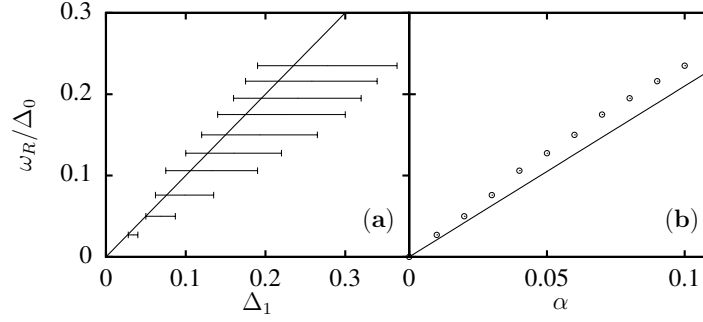


Figura 4.6: (a) Dependencia de ω_R como función de Δ_1 ambos extraídos de la simulación numérica. La línea corresponde a la predicción de la Ec. (4.33) considerando una amplitud constante Δ_1 y haciendo la aproximación $\bar{\Delta} = \Delta_0$. La barra de error indica el rango $\Delta_1^{\min} < \Delta_1 < \Delta_1^{\max}$ (ver el texto principal). (b) ω_R como función de α . Los círculos vacíos representan a la ω_R extraída del cálculo numérico mientras que la línea continua es el valor estimado usando la Ec. (4.33) donde Δ_1 depende de α de acuerdo con la Ec. (4.27). La expresión analítica final para ω_R es la Ec. (4.34).

produce oscilaciones de Rabi de los RAP con una frecuencia

$$\omega_R = \Delta_1 \sqrt{1 - \left(\frac{2\bar{\Delta}}{\omega_d} \right)^2}, \quad (4.33)$$

proporcional a Δ_1 . Para reafirmar que la frecuencia de Rabi-Higgs ω_R es consecuencia de este mecanismo, hemos extraído, para cada valor de α , los valores de Δ_1 (Δ_1^{\min} y Δ_1^{\max}), $\bar{\Delta}$ y ω_R de la solución numérica y lo comparamos con la ω_R que se obtiene de usar la Ec. (4.33). La Fig. 4.6 (a) muestra ω_R en función de Δ_1 . El mínimo (Δ_1^{\min}) y el máximo (Δ_1^{\max}) de amplitud de oscilación del parámetro de orden superconductor se representan con una barra de error horizontal. Considerando en la Ec. (4.33) un Δ_1 fijo efectivo dentro de su rango de variación temporal puede observarse un buen acuerdo con la simulación numérica exacta. La figura 4.6 (b) muestra la frecuencia del modo Rabi-Higgs en función de la amplitud de la perturbación. La línea es el resultado de la Ec. (4.33) donde el valor de Δ_1 elegido es el predicho por la respuesta lineal, Ec. (4.27). Esta aproximación resulta ser sorprendentemente buena como se aprecia en la figura.

4.4.3. Consecuencias del modo Rabi-Higgs: inversión de población

Ahora analizamos cómo el modo Rabi-Higgs afecta a diferentes observables. En la Fig. 4.7 se muestra la textura de pseudoespín para distintos instantes de tiempo. Los pseudoespines están identificados por la energía de cuasipartículas ξ_k y para $t < 0$ se muestra la distribución de equilibrio. Los colores representan el valor de la proyección de los pseudoespines en las diferentes direcciones x, y, z . Observe que las fluctuaciones en $\langle S_k^y \rangle$, que determinan la parte imaginaria del parámetro de orden [confrontar con Ec. (4.3)], son impares, por lo que se cancelan cuando se efectúa

la suma sobre \mathbf{k} . Por lo tanto, solo las fluctuaciones de amplitud del *gap* entran en juego en $\mathbf{b}_{\mathbf{k}}(t)$. La frecuencia ω_d es visible en la respuesta dinámica de todas las proyecciones. Su período $\mathcal{T} = 2\pi/\omega_d$ se corresponde con las franjas verticales indicadas por flechas negras en el panel superior de la Fig. 4.7. Se puede ver como, la mayoría de los pseudoespines solo precesan, con pequeñas fluctuaciones, alrededor de sus valores de equilibrio. Por el contrario, el conjunto de RAP cuyas cuasienergías son aproximadamente ξ_{k_r} (indicado con flechas horizontales blancas), responde fuertemente al estímulo externo y exploran toda la esfera de Bloch en el período de Rabi τ , el cual ha sido señalado con una flecha doble horizontal blanca en el panel inferior de la Fig. 4.7. Dicho período coincide con el período del modo Rabi-Higgs. Como ocurre para los espines usuales en los experimentos análogos de RMN, el conjunto de RAP realiza oscilaciones lentas desde la posición de equilibrio hasta su antípoda en la esfera de Bloch y rotaciones rápidas alrededor del eje que une estos puntos. Dicha dirección, corresponde aproximadamente al campo de equilibrio $\mathbf{b}_{k_r}^0 = 2\Delta_0 \hat{x} + 2\xi_{k_r} \hat{z}$ y es una función de ω_d a través de la condición de resonancia Ec. (4.29).

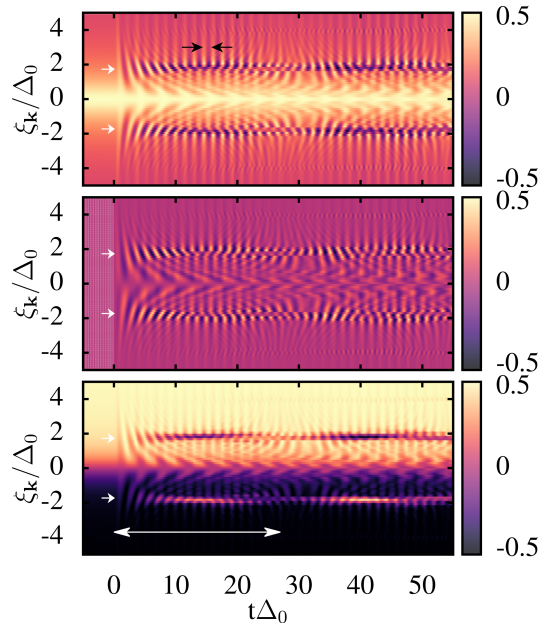


Figura 4.7: Evolución de los pseudoespines como función del tiempo para $\alpha = 0.1$. El panel superior, intermedio e inferior corresponden a $S_{\mathbf{k}}^x$, $S_{\mathbf{k}}^y$ y $S_{\mathbf{k}}^z$ respectivamente. La textura de los pseudoespines en equilibrio se muestra para $t < 0$ (ver Ec. (4.4)). El conjunto de RAP cuya energía se encuentra en la vecindad de $\pm\sqrt{3}\Delta_0$ ha sido indicado con flechas blancas. El período asociado con la frecuencia de la perturbación es marcado con líneas negras en el panel superior. Por otro lado, el período $\tau\Delta_0 \simeq 27$ el cual aparece en la dinámica de los RAP se indica con una doble flecha blanca en el panel inferior. Dicho período coincide con el período τ asociado al modo Rabi-Higgs que se observa en $\Delta(t)$.

Debemos tener en cuenta que los fenómenos observados acá, requieren una sincronización de un número macroscópico de pseudoespines debido a las interacciones entre ellos como consecuencia de la autoconsistencia del problema. Por lo tanto,

el conjunto de RAP no se limita a un solo pseudoespín que satisfacen estrictamente la condición de resonancia (4.29), sino que hay una distribución en las energías de cuasipartículas, con un ancho finito alrededor de un valor central, que participa en el proceso.

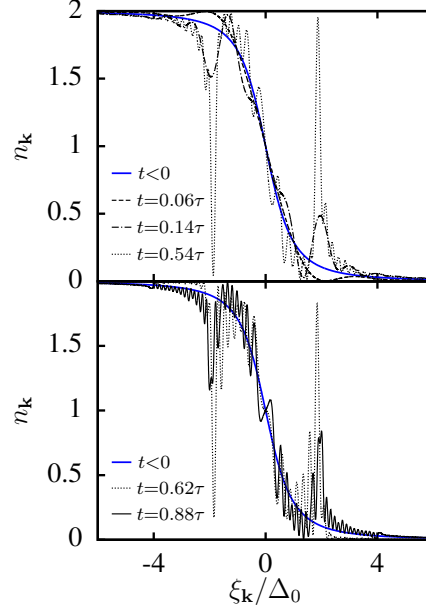


Figura 4.8: Valores de ocupación n_k a distintos instantes de tiempo para $\alpha = 0.1$ ($\tau\Delta_0 \simeq 27$). Debido a que aparece una inversión de población periódica para los RAP, se obtiene una fuerte fluctuación de n_k para estos estados resonantes. Los valores de n_k en equilibrio corresponden a la línea azul la cual es identificada como $t < 0$ en la leyenda de la figura.

Una consecuencia física importante del modo Rabi-Higgs es la existencia de una inversión de población de los RAP que ocurre con periodicidad τ . La Fig. 4.8 muestra como se refleja este fenómeno en los valores de ocupación n_k los cuales están relacionados con algunos cortes verticales del panel inferior de la Fig. 4.7 para diferentes instantes de tiempo, a través de la expresión $n_k = n_{k\uparrow} + n_{-k\downarrow} = 1 - 2\langle S_k^z \rangle$. Se ve claramente que los valores de ocupación n_k asociados con el conjunto de RAP oscilan entre los valores máximos y mínimos permitidos, mientras que los valores de ocupación correspondientes al resto de la textura de pseudoespín se ven ligeramente afectados.

Esto sugiere que una forma natural de detectar la existencia del modo Rabi-Higgs (u otros modos colectivos similares) podría ser la espectroscopía de fotoemisión con resolución en ángulo y tiempo (tr-ARPES) a partir de la cual se puede obtener la distribución de momento integrando en energía. Es de esperar también que la microscopía de efecto túnel pueda proporcionar información sobre los modos tipo Rabi, aunque, sabiendo que la resolución temporal de dicha espectroscopía (en su versión más simple) es mucho menor, probablemente solo se podrá acceder a la información integrada en el tiempo en montajes experimentales de poca complejidad. El cálculo explícito de estas cantidades será presentado en el próximo capítulo.

4.4.4. Fase dinámica de superconductividad de *gap* nulo

Hasta ahora hemos mantenido la amplitud de la perturbación periódica en valores relativamente pequeños ($\alpha \leq 0.1$), donde el *gap* superconductor muestra una fuerte respuesta no lineal con un modo Rabi-Higgs de oscilación. Al aumentar α hemos encontrado un valor crítico $\alpha_c \simeq 0.3$ por encima del cual, la dinámica cambia por completo. Para valores de α cercanos a α_c , los detalles de la dinámica del *gap* se vuelven mucho más complicados y no es de nuestro interés hacer una caracterización detallada de la misma en la presente tesis. Lo que nos interesa discutir ahora es que para α suficientemente grande, encontramos una nueva fase superconductora (de *gap* nulo) para el sistema fuera de equilibrio.

La Fig. 4.9 (a) muestra, en escala logarítmica-lineal, la dinámica del *gap* para diferentes valores de α . El parámetro de orden superconductor, primero aumenta y luego va a cero exponencialmente en el tiempo mostrando pequeñas oscilaciones con la frecuencia de la perturbación. Como se muestra en la Fig. 4.9 (b), dentro de esta fase sin *gap*, la componente x de la textura de pseudoespín $\langle S_k^x \rangle$ no es cero pero si su promedio. Esto refleja el hecho de que hay correlaciones de pares entre fermiones, por ejemplo $\langle c_{k\uparrow}^\dagger(t) c_{-k\downarrow}^\dagger(t) \rangle \neq 0$ para la mayoría de los k , aunque $\Delta(t) = 0$ como consecuencia del fuerte desfase que existe entre los distintos pseudoespines. Para caracterizar este estado, definimos la cantidad $\zeta = \beta \sum_k \langle S_k^x \rangle^2$ donde elegimos β tal que $\zeta = 1$ para $t = 0$ (equilibrio). Mientras que el *gap* superconductor (esencialmente, el promedio de $\langle S_k^x \rangle$) va a cero (en la escala de la figura) y permanece así durante largos períodos de tiempo, ζ tiende a un valor constante finito como se muestra en la Fig. 4.9(c).

Debemos enfatizar que, distinto a la fase dinámica II discutida en el primer capítulo, este nuevo régimen de superconductividad sin *gap* se obtiene bajo la acción continua de la perturbación periódica.

4.5. Uso de las oscilaciones de Rabi-Higgs para generar las fases dinámicas del modelo de BCS

Las fases dinámicas espontáneas (en ausencia de perturbaciones dependientes del tiempo) de un condensado fermiónico se estudiaron detalladamente en el capítulo 1. En la propuesta teórica inicial [48, 49, 51], estas fases fueron obtenidas apelando a sistemas atómicos ultrafríos en los cuales uno puede practicar un protocolo de control en el que la interacción atractiva cambia abruptamente en cierto instante de tiempo. A pesar de los intensos estudios teóricos centrados en las peculiaridades de los átomos ultrafríos [78, 79], tales fases no se han encontrado experimentalmen-

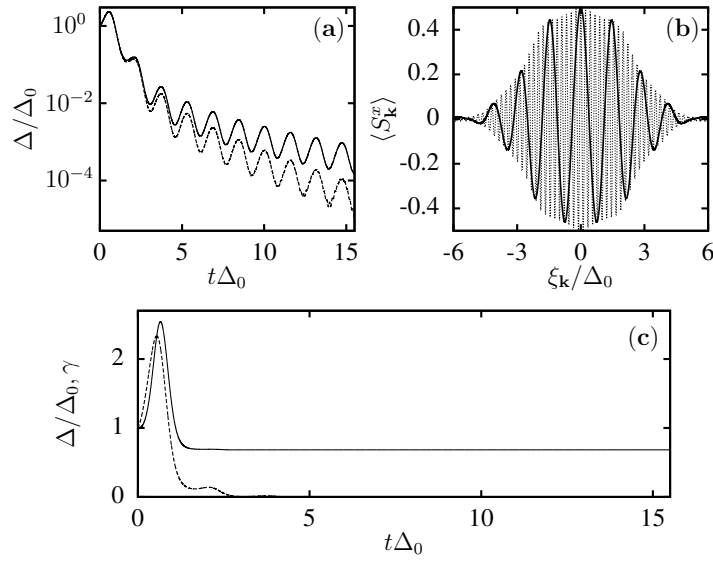


Figura 4.9: (a) Dinámica del parámetro de orden, en escala logarítmica-lineal, para $\alpha = 0.305$ y $\alpha = 0.31$ en línea continua y discontinua respectivamente. (b) La componente x de la textura de pseudoespín a $t\Delta_0 = 3$ (línea continua) y $t\Delta_0 = 15$ (línea punteada) para $\alpha = 0.31$ lo cual corresponde al régimen de superconductividad sin *gap*. (c) *Gap* superconductor (línea discontinua) y ζ (línea continua) como función del tiempo para $\alpha = 0.31$. La definición de ζ está dada en el texto.

te hasta el momento. La situación es incluso peor en los sistemas de estado sólido, donde es difícil imaginar cómo se puede lograr un cambio grande en la interacción atractiva de forma instantánea con un buen grado de control para acceder a fases de oscilaciones persistentes del parámetro de orden superconductor. En esta sección, proponemos una nueva alternativa para la generación de fases dinámicas espontáneas basadas en el uso del modo Rabi-Higgs la cual se puede aplicar tanto a los átomos ultrafríos como a los sistemas de estado sólido.

La idea es aplicar la perturbación periódica durante un tiempo $t^* < \tau$, es decir, más pequeño que un ciclo completo de Rabi, de tal manera que solo se haya logrado una fracción de la inversión de población de los RAP. Entonces se permite que el sistema evolucione espontáneamente sin el estímulo externo a partir de $t = t^*$. En el caso de las perturbaciones periódicas asistidas por fonones, generadas con el mecanismo de ISRS, el movimiento de la red se puede detener aplicando un segundo pulso, retrasado del primero en un tiempo igual a un número semientero del período de la perturbación, es decir, $(n + \frac{1}{2}) \mathcal{T}$, lo cual se puede demostrar fácilmente por ejemplo resolviendo las ecuaciones de movimiento para un oscilador armónico en presencia de un campo alterno con las características antes mencionadas. Por otro lado, las perturbaciones periódicas debidas a radiación en el THz y las perturbaciones periódicas en átomos ultrafríos se pueden controlar a voluntad en los montajes experimentales convencionales.

En el protocolo que proponemos, la dinámica del modo Rabi-Higgs se utiliza

para preparar una condición inicial para la posterior evolución temporal del hamiltoniano BCS libre (en ausencia de perturbaciones). Se han utilizado diferentes protocolos en trabajos anteriores (pulsos de luz, etcétera) para conseguir distintas condiciones iniciales y solo se han obtenido (teóricamente) hasta el momento oscilaciones amortiguadas y dinámica sobreamortiguada de $\Delta(t)$ (fase dinámica I y II) [107, 142]. En nuestro caso, demostraremos cómo acceder a *todas* las fases dinámicas del parámetro de orden superconductor usando las oscilaciones de Rabi-Higgs. La novedad de nuestra propuesta es que podemos inducir una inversión total de población en la textura de pseudoespín como condición inicial y es precisamente esto lo que hace posible la existencia de la fase de oscilaciones persistentes del *gap* superconductor (fase III).

4.5.1. Resultados numéricos

Probamos este protocolo numéricamente resolviendo la dinámica de los pseudo-espines para un $\lambda(t)$ que se enciende en $t = 0$ como antes, y que apagamos en $t = t^*$. Consideraremos distintos valores de t^* dentro del primer período de Rabi del *gap* superconductor, después de los cuales el parámetro de orden evoluciona espontáneamente (en ausencia de perturbaciones). Interesantemente, para valores moderados de α obtenemos básicamente dos fases dinámicas, correspondientes al modo de oscilación amortiguado del *gap* (fase I) u oscilaciones persistentes del parámetro de orden (fase III), dependiendo de la fracción del ciclo de Rabi que se haya completado al tiempo t^* . Esto será parametrizado convenientemente por el cociente t^*/τ .

La figura 4.10 muestra la evolución del *gap* para dos valores de t^*/τ . Para t^*/τ pequeño, el *gap* se aproxima asintóticamente a un valor constante $\Delta_\infty < \Delta_0$ que exhibe el comportamiento oscilatorio bien conocido con un decaimiento del tipo $1/\sqrt{t}$ y frecuencia $2\Delta_\infty$ [48, 49, 51]. Para valores intermedios de $t^*/\tau \sim 0.5$, la dinámica superconductora muestran oscilaciones persistentes espontáneas entre los dos extremos Δ_\pm como las que se obtuvieron anteriormente usando el protocolo de cambio súbito de la interacción atractiva [48, 49, 51]. El diagrama de fase para el protocolo propuesto en esta sección, con los valores asintóticos del *gap* (Δ_∞) y los valores Δ_\pm , se muestra en el panel inferior de la Fig. 4.10. La región gris corresponde con la fase de oscilaciones persistentes (fase III), mientras que la región blanca corresponde con la fase de oscilaciones amortiguadas del *gap* superconductor (fase I).

En la sección anterior, para valores grandes de α , hemos obtenido una fase superconductora en la cual hay correlación entre los pares de Cooper pero el *gap* es nulo (disminuye exponencialmente a cero como función del tiempo) en presencia de la perturbación periódica (ver Fig. 4.9(a)). Es natural preguntarse cuál es el destino de este fase si la perturbación se apaga en un instante t^* en el régimen de *gap*

nulo. Hemos verificado que si $\Delta(t^*)$ es lo suficientemente pequeño, el régimen de superconductividad sin *gap* permanece en ausencia de perturbación periódica (fase II). Un resultado similar ha sido demostrado en Ref. [142] donde se estudió la respuesta superconductora después de la acción de un pulso de luz corto. En este caso, la fase dinámica II puede obtenerse si la amplitud del pulso de luz es suficientemente grande como para suprimir considerablemente el *gap* superconductor antes de que este evolucione libremente.

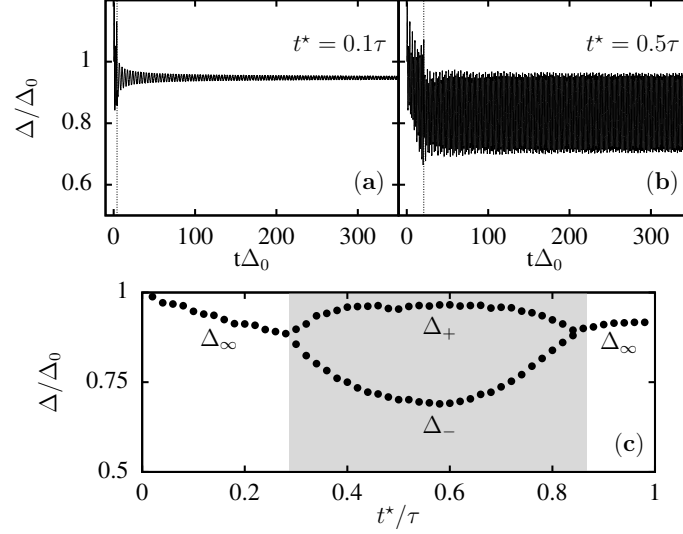


Figura 4.10: Panel superior: Dinámica del *gap* superconductor usando el protocolo de encendido y apagado para $\alpha = 0.06$ y distintos valores de t^* . Dichos valores de t^* son señalados con una línea vertical discontinua e indicados en cada panel como función del período asociado con el RAP $\tau\Delta_0 \simeq 42$. Panel inferior: Diagrama de fase como función de t^*/τ . Las regiones blancas corresponden a las oscilaciones amortiguadas del *gap* mientras que la región gris corresponde al régimen de oscilaciones persistentes. Además en este diagrama se muestra los parámetros del *gap* que caracterizan la dinámica correspondiente ($\Delta_\infty, \Delta_\pm$). Los cambios de fase vienen dados para $t^* \simeq 0.3\tau$ y $t^* \simeq 0.87\tau$ y coinciden aproximadamente con la posición en la cual los RAP están orientados perpendicular al campo de equilibrio $b_{k_r}^0$.

Es interesante señalar que el diagrama de fase dinámico de la Fig. 4.10 es consistente con el método de vector Lax utilizado en la literatura [50, 51] que oportunamente hemos introducido en el capítulo 1.

En la Ref. [51] se demostró que la dinámica del parámetro de orden está relacionada con el número m de pares aislados de raíces Lax complejas conjugadas. De hecho, $\Delta(t)$ muestra oscilaciones persistentes a tiempos largos con un número de frecuencias k si $m > 1$, mientras que $\Delta(t) \rightarrow \Delta_\infty$ (oscilaciones amortiguadas) si $m = 1$, siendo k la parte entera de $m/2$.

Con el objetivo de verificar los resultados numéricos, calculamos las raíces del vector Lax (raíces Lax) evaluando dicho vector en la textura instantánea de pseudoespín al tiempo t^* , es decir, en la condición inicial (después de la acción de la perturbación periódica) para la posterior evolución espontánea. Como ejemplo, mostramos en la Fig. 4.11 (a-b) las raíces Lax en el plano complejo para los mismos valores

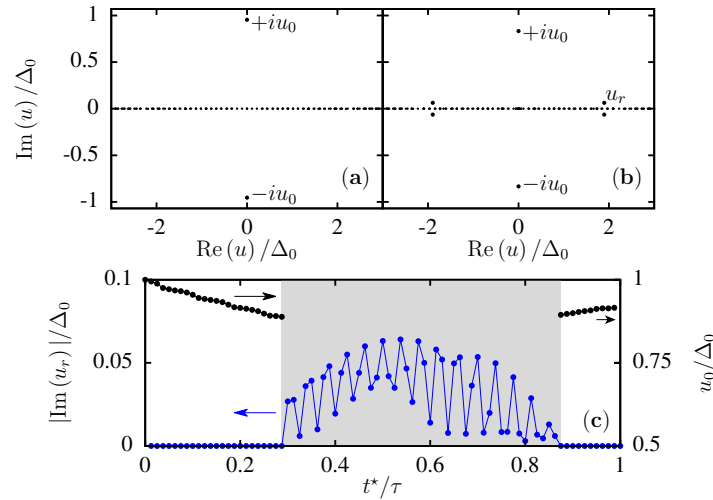


Figura 4.11: En el panel superior se muestran las raíces Lax obtenidas usando la textura de pseudospín a $t^* = 0.1\tau$ a) y $t^* = 0.5\tau$ b) con $\alpha = 0.06$. En el panel inferior se observa la parte imaginaria de las raíces Lax como función de t^*/τ .

de t^*/τ que se usaron en los paneles superiores de la Fig. 4.10. Consistentemente con los resultados numéricos, para $t^* = 0.1\tau$ obtenemos un par de raíces Lax aisladas ($m = 1$: dinámica amortiguada) y para $t^* = 0.5\tau$ obtenemos $m = 3$ (oscilaciones persistentes).

Para cualquier valor de t^* tenemos un par de raíces Lax aisladas puramente imaginarias $\pm iu_0$ más un continuo de raíces doblemente degeneradas en el eje real. En el régimen amortiguado, el valor absoluto de las raíces puramente imaginarias determina el valor asintótico del *gap* superconductor. Esto es $\Delta_\infty = u_0$ [49]. En la fase dinámica de oscilaciones persistentes, aparecen dos pares adicionales de raíces aisladas $\pm u_r$ ($\pm u_r^*$) (ver Fig. 4.11(b)). Encontramos numéricamente que la parte real de dichas raíces $\text{Re}(u_r)$ se encuentra en la vecindad de ξ_{k_r} y la parte imaginaria es algún valor finito. Variando t^*/τ , el cambio de comportamiento al régimen amortiguado está determinado por $\text{Im}(u_r) \rightarrow 0$. En el panel inferior de la Fig. 4.11 graficamos la parte imaginaria de estas raíces Lax u_r en función de t^* lo cual reproduce el diagrama de fase obtenido numéricamente [comparar con la Fig. (4.10)]. También mostramos los valores de u_0 como función de t^* lo cual coincide con los valores de Δ_∞ que se obtuvieron numéricamente y que han sido graficados en la Fig. 4.10.

4.6. Conclusiones

En este capítulo hemos demostrado que en un superconductor BCS sujeto a una perturbación periódica en el tiempo muestra oscilaciones de Rabi-Higgs con una frecuencia que depende de la amplitud de la perturbación. Hemos discutido varias alternativas para implementar dichas perturbaciones periódicas tanto en sistemas

de materia condensada como en sistemas de átomos fríos.

Existen algunos estudios previos que analizan la respuesta superconductora en presencia de perturbaciones periódicas [54, 57, 99] lejos del régimen difusivo de Eliashberg. Sin embargo, sus cálculos se limitan al estudio de la función respuesta (susceptibilidad) solo a algunos órdenes en la frecuencia de la perturbación [54, 57, 105]. Nuestros resultados van más allá de dichos formalismos al tener en cuenta la respuesta dinámica no lineal completa (a todos los órdenes en la frecuencia de la perturbación). Recientemente, en Ref. [99] se encuentra una oscilación lenta del parámetro de orden superconductor bajo una perturbación periódica, en un modelo en el que la superconductividad está cerca de una inestabilidad de onda de densidad de carga. En este caso, el sistema oscila periódicamente entre diferentes órdenes con una frecuencia mucho más lenta que la frecuencia de la perturbación. Sin embargo, debemos aclarar que, nuestros resultados se aplican al caso más general de un superconductor BCS que no está cerca de otro orden y en el que las oscilaciones del *gap* son siempre dentro de un mismo orden de largo alcance (la superconductividad).

En sistemas reales de estado sólido y de átomos fríos, en general puede haber procesos que van más allá del campo medio de BCS. En particular, puede haber términos de colisiones en el hamiltoniano (interacciones coulombianas, o electrón-fonón residual) que hacen relajar las poblaciones fuera del equilibrio. Es difícil predecir de antemano qué sistema puede cumplir el requisito de que el tiempo de coherencia sea lo suficientemente largo como para ver las oscilaciones de Rabi-Higgs. En general, una perturbación de baja intensidad puede reducir el posible efecto de calentamiento en la muestra, pero al mismo tiempo da lugar a oscilaciones de Rabi más lentas que pueden requerir un mayor tiempo de coherencia para su observación experimental. Por lo tanto, se debe encontrar una compensación de ambos efectos que dependerá del mecanismo de perturbación específico que se emplee y del material en cuestión. Para observar los modos Rabi-Higgs obtenidos en este capítulo, la frecuencia del estímulo externo debe ser mayor que $2\Delta_0$ pero menor que la frecuencia de corte asociada al mecanismo que da origen a la superconductividad. Manteniendo α y el cociente ω_d/Δ_0 como parámetros fijos, la frecuencia de Rabi escala linealmente con el *gap* [contrastar con Ec. (4.27) y Ec. (4.33)]:

$$\omega_R = \alpha |1 + \chi_{\Delta,\Delta}(\omega_d)| \Delta_0 \sqrt{1 - \left(\frac{2\Delta_0}{\omega_d}\right)^2}, \quad (4.34)$$

de esta forma, reducir el *gap* hace que la oscilación de Rabi sea más larga ($\tau \sim 1/\Delta_0$). Por otro lado, los tiempos de coherencia suelen variar más rápido con la energía de las cuasipartículas. Por ejemplo, en un líquido de Fermi, el decaimiento debido a la interacción electrón-electrón va como $1/\omega^2$. Por lo tanto, trabajar con materiales

de *gap* pequeño puede ser beneficioso ya que los tiempos de coherencia pueden ser más largos que el período de Rabi que uno quisiera medir. Teniendo en cuenta que el sistema no es un líquido de Fermi sino un superconductor, la situación es, por supuesto, aun mejor. En este sentido, es útil remarcar que las oscilaciones de Rabi no tienen precedentes en superconductores de materia condensada, pero si tienen una larga historia en semiconductores [143–145] y son parte de la “caja de herramientas” moderna de las tecnologías cuánticas de estado sólido [146–149].

Hemos discutido perturbaciones dependientes del tiempo que preservan la simetría de la red y se acoplan a los modos de Higgs. También es posible aplicar perturbaciones que no conservan la simetría de la red y que se acoplan por ejemplo, a las fluctuaciones de carga con simetría B_{1g} y B_{2g} en el caso de una red cuadrada. Estas excitaciones producirán oscilaciones de carga tipo Rabi, completamente análogas a las oscilaciones de Rabi-Higgs. Una ventaja de estos modos es que al ser Raman activos modulan las propiedades ópticas del material como lo hacen los modos espontáneos de oscilación [66, 104]. Por lo tanto, pueden estudiarse con experimentos ópticos, por ejemplo excitando en el rango de los THz y monitoreando la reflectividad diferencial con luz visible.

Como posible aplicación, hemos mostrado cómo el Rabi-Higgs inducido puede usarse para observar las fases dinámicas espontáneas predichas en el marco de la teoría de BCS [48, 49, 51] y que hasta ahora no han sido observadas en su totalidad. Las propuestas originales fueron esencialmente pensadas para sistema atómicos ultrafríos usando un protocolo que implica una perturbación instantánea que en algunos casos necesita ser muy intensa para obtener superconductividad sin *gap* u oscilaciones persistentes del parámetro de orden. En cambio, nuestra propuesta se basa en una perturbación menos intensa, aplicada durante un tiempo moderado, aprovechando las propiedades del condensado superconductor. Esto abre una nuevo abanico de oportunidades para lograr que estas fases sean accesibles incluso en sistemas de materia condensada.

Los resultados de este capítulo constituyen ejemplos de control cuántico de la función de onda del condensado. En este caso, la población de un conjunto de cuasipartículas se invierte periódicamente en el tiempo. La fuerte analogía con la NMR y el control cuántico en estado sólido [143–149] marcan el camino para seguir profundizando en el tema y explorar por ejemplo la posibilidad de observar otros fenómenos fascinantes como los ecos de Hahn [150] o propagación de solitones [151] haciendo uso de protocolos bien establecidos en NMR u otros protocolos ópticos en superfluidos fermiónicos.

Capítulo 5

Dinámica no lineal del superconductor acoplado a un baño térmico y su posible detección usando espectroscopías con resolución temporal

En el capítulo anterior hemos demostrado que, en el marco de la teoría BCS, una perturbación periódica con frecuencia ω_d en resonancia con el espectro de cuasipartículas ($\omega_d > 2\Delta_0$), puede producir oscilaciones de Rabi con una frecuencia que es proporcional a la amplitud de la perturbación, dando lugar a un nuevo modo colectivo de oscilación del parámetro de orden superconductor llamado modo "Rabi-Higgs".

Para poder observar el modo Rabi-Higgs es necesario excitar al superconductor en un régimen de respuesta no lineal; en una escala de tiempo menor que los tiempos de relajación y decoherencia del sistema. Uno de los objetivos de este capítulo, es determinar bajo qué condiciones se puede lograr dicho régimen.

Los efectos de relajación de energía en un sistema de dos niveles en presencia de una perturbación periódica dependiente del tiempo es un problema bien conocido en la literatura [152]. El modo más sencillo de introducir relajación es considerar fenomenológicamente un tiempo de relajación \mathcal{T} en el marco de las ecuaciones de Bloch [152]. En este caso, la dinámica del sistema muestra un régimen de respuesta lineal a tiempos largos para pequeñas amplitudes de la perturbación [152]. Por otro lado, un régimen no lineal de oscilaciones de Rabi aparece como un fenómeno transitorio a tiempos cortos para amplitudes de la perturbación suficientemente grandes de modo que la frecuencia de Rabi sea mayor que $1/\mathcal{T}$. Esta fenomenología, propia

del sistema de dos niveles, ha sido obtenida en otros contextos; por ejemplo en el caso de grafeno en presencia de campos eléctricos fuertes dependientes del tiempo [153].

Si bien la extensión de dichos resultados al caso de *muchos* sistemas de dos niveles que interactúan entre sí no es obvia, en este capítulo obtendremos regímenes similares en la respuesta dinámica de un superconductor BCS acoplado a un baño térmico con el cual intercambia energía y se encuentra bajo la acción de una perturbación periódica. En particular, demostraremos que la observación del modo Rabi-Higgs, requiere tiempos de relajación largos y/o perturbaciones fuertes lo cual garantiza que la frecuencia de Rabi-Higgs $\omega_R > 1/\mathcal{T}$, siendo \mathcal{T} el tiempo de relajación de energía que introduce el acoplamiento con el reservorio externo.

En condiciones favorables, el tiempo de relajación en un superconductor puede ser extremadamente grande, lo cual se deduce de los picos de coherencia bien angostos que se observan en la densidad de estados de superconductores convencionales tales como el aluminio [154]. Usando la fórmula de Dynes discutida en el capítulo 3 para explicar la densidad de estados que se obtiene de los experimentos de microscopía de efecto túnel, uno puede estimar el tiempo de relajación provisto por el baño como el inverso del parámetro de Dynes $\mathcal{T} \equiv 1/\Gamma$. El inverso del parámetro de Dynes ha sido medido en muestras delgadas de aluminio en la fase superconductora y resulta ser $1/\Gamma \sim 10^6/\Delta_0 \sim \mu\text{s}$ [154] lo cual garantiza la existencia de una amplia ventana temporal donde es posible observar la respuesta no lineal del superconductor antes de que los efectos de relajación jueguen un papel determinante. De hecho, para las amplitudes de la perturbación periódica utilizadas en el capítulo anterior, el período de Rabi-Higgs $\tau_R \equiv 2\pi/\omega_R$ es del orden de $10/\Delta_0$ o $10^2/\Delta_0$ lo cual es muchísimo menor que \mathcal{T} (ver por ejemplo Fig. 3.5). Por otro lado, debemos mencionar que el estimado que hemos hecho para \mathcal{T} es probablemente muy optimista si consideramos que la misma dinámica de cuasipartículas fuera de equilibrio podría generar nuevos canales para la relajación de energía [155]. Para ello debemos considerar otros grados de libertad y tratar el problema completo de muchos cuerpos fuera de equilibrio de manera autoconsistente para el caso de la superconductividad, lo cual va más allá del objetivo de la presente tesis.

En este capítulo consideraremos la competencia entre la respuesta no lineal del superconductor (por ejemplo modos Rabi-Higgs) y los efectos de disipación que aparecen al considerar el sistema acoplado a un baño térmico. Para el reservorio externo tendremos en cuenta el modelo más simple posible descrito por un hamiltoniano estático de partícula libre en el límite de banda ancha que hemos introducido en el capítulo 2. De esta forma, el acoplamiento con el reservorio solo introduce un parámetro semifenomenológico que da lugar a un ensanchamiento de los niveles de energía. Bajo estas aproximaciones estudiamos la posible detección de no lineali-

dades, tales como el modo Rabi-Higgs, usando espectroscopías resueltas en tiempo para distintos valores del acoplamiento con el baño y otros parámetros característicos de la técnica experimental a utilizar. En lo que sigue demostraremos como ambas espectroscopías tr-ARPES y STM con resolución temporal, son apropiadas para la identificación de oscilaciones de Rabi-Higgs a tiempos cortos en presencia de mecanismos de relajación. Gracias al acoplamiento del superconductor con el baño externo el sistema alcanza un estado estacionario fuera de equilibrio a tiempos largos con interesantes no linealidades no observadas hasta el momento en superconductores BCS en presencia de perturbaciones periódicas. También en este capítulo demostraremos la posibilidad de generar segundos armónicos en la respuesta superconductora y nuevas oscilaciones de Rabi como consecuencia, al aumentar la amplitud de la perturbación. En este caso, el modo de Rabi-Higgs es mucho más lento y por ende menos factible de observar en presencia de mecanismos de relajación de energía.

5.1. Modos Rabi-Higgs en presencia de disipación provista por el baño

En lo que sigue, del mismo modo que en el capítulo anterior, consideraremos como perturbación la modulación periódica en el tiempo de la interacción atractiva λ . Aún en presencia del mecanismo de relajación introducido en el capítulo 2, uno espera que una modulación periódica de la densidad de estados arroje resultados similares.

En ausencia de un reservorio externo, hemos demostrado, en el capítulo anterior, que por pequeña que sea la amplitud de la perturbación, si $\omega_d > 2\Delta_0$ se obtienen oscilaciones de Rabi-Higgs. Aparentemente, el modo Rabi-Higgs prohíbe la aparición de un régimen de respuesta lineal. De hecho, en ausencia de un baño externo, el sistema se vuelve inherentemente no lineal a tiempos largos sin importar cual sea la amplitud de la perturbación (tarde o temprano aparecen oscilaciones de Rabi). En analogía con el sistema de dos niveles, uno puede intuir que en presencia de mecanismos de relajación de energía debido al acoplamiento con el reservorio, este comportamiento ideal desaparezca y que exista un régimen de respuesta lineal en algún límite. Los resultados numéricos que presentamos a continuación son consistentes con esta hipótesis.

En lo que sigue mostramos la dinámica del parámetro de orden superconductor ante una perturbación periódica de la interacción atractiva con una frecuencia $\omega_d = 4\Delta_0$ y distintas amplitudes de oscilación. Resultados similares pueden obtenerse para otras frecuencias siempre que $\omega_d > 2\Delta_0$. A $t \leq 0$ el sistema está en equilibrio y

el parámetro de orden Δ_0 viene dado por la ecuación

$$1 = \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\lambda_0}{E_{\mathbf{k}}} \arctan \left(\frac{2E_{\mathbf{k}}}{\gamma} \right). \quad (5.1)$$

A $t = 0$ comienza a actuar la perturbación periódica $\lambda(t) = \lambda_0[1 + \Theta(t) \alpha \sin(\omega_d t)]$ y se calcula la dinámica de la función de Green menor para $t = t'$, $\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t, t) \equiv \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t)$ a través de la ecuación

$$\partial_t \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t) = -\gamma \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t) + \mathcal{I}_{\mathbf{k}}(t) - i[\mathbf{H}_{\mathbf{k}}(t), \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t)], \quad (5.2)$$

cuya condición inicial viene dada por

$$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(0) = \frac{i}{2} \mathbf{I} - \frac{i}{\pi E_{\mathbf{k}}} \arctan \left(\frac{2E_{\mathbf{k}}}{\gamma} \right) \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & -\Delta_0 \\ -\Delta_0 & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

y donde

$$\mathcal{I}_{\mathbf{k}}(t) = \frac{i\gamma}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt' \left(\frac{\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{R(0)}(t, t')}{t - t' - i0^+} + \frac{\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{R(0)}(t, t')^\dagger}{t - t' + i0^+} \right) e^{-\frac{\gamma(t-t')}{2}}, \quad (5.4)$$

$\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{R(0)}(t, t')$ es la función de Green retardada en ausencia del baño, $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}(t)$ es el hamiltoniano BCS en la representación de Nambu y γ es el parámetro que da cuenta del acoplamiento entre el superconductor y el reservorio tal y como fue introducido en el capítulo 2. Por su parte, la dinámica del *gap* superconductor viene dada de manera autoconsistente por $\Delta(t) = -i\lambda(t) \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t)_{12}$. En este capítulo empleamos el mismo formalismo utilizado en el capítulo 2, solo que en lugar de estudiar un cambio súbito en la interacción atractiva ahora estamos interesados en los efectos que produce una modulación periódica de la misma.

5.1.1. Efectos no lineales en ausencia de un reservorio externo: modos Rabi-Higgs y generación de segundos armónicos

En esta sección presentamos brevemente los resultados de la respuesta dinámica del superconductor sin los efectos del reservorio con el objetivo de: 1) mostrar que el formalismo de Keldysh para las funciones de Green reproduce correctamente los resultados obtenidos en el capítulo anterior usando el formalismo de pseudoespines de Anderson, 2) discutir un nuevo fenómeno no lineal (generación de segundos armónicos) que aparece para amplitudes de la perturbación más grandes que los usados previamente y 3) contrastar dichos resultados con aquellos en los que el efecto del baño juega un papel determinante.

En este capítulo consideraremos valores grandes de α ($\alpha \sim 0.4$) por encima de

lo que experimentalmente resulta más factible ($\alpha \leq 0.2$). En este caso, es posible acceder a nuevos regímenes no lineales de generación de segundos armónicos en la respuesta transitoria del sistema y también no linealidades en el estado estacionario tales como saturación del desbalance de la población de cuasipartículas en presencia de un baño térmico.

En ausencia de disipación, $\Delta(t)$ se calcula considerando la evolución temporal de la función de Green menor dada solamente por el conmutador de dicha función de Green con el hamiltoniano (Ec. (5.2) sin los dos primeros términos del lado derecho de la ecuación). La dinámica del parámetro de orden superconductor y el correspondiente valor de expectación de la función de distribución de momento,

$$n_{\mathbf{k}}(t) = \sum_{\sigma} \left\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}(t) c_{\mathbf{k}\sigma}(t) \right\rangle = 1 - i [\mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{<}(t)_{11} - \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^{<}(t)_{22}] \quad (5.5)$$

se muestran en la Fig. 5.1 para dos valores distintos de α . En este caso, se obtienen las oscilaciones de Rabi-Higgs en total acuerdo con lo obtenido anteriormente usando el formalismo de pseudoespines de Anderson. Dicho modo está asociado con una inversión periódica de la población de cuasipartículas en resonancia con la perturbación. Para $\omega_d = 4\Delta_0$, es posible apreciar, en la función de distribución de momento $n_{\mathbf{k}}(t)$, una dependencia temporal a la energías $\xi_{\mathbf{k}} \approx \pm 2\Delta_0$ (cuasipartículas en resonancia con la perturbación periódica) con un período que coincide con el período de Rabi-Higgs de $\Delta(t)$ (Fig. 5.1). Note que la inversión de los colores a lo largo de dicha estructura angosta representa una inversión cíclica de la población de cuasipartículas en resonancia. Dicha dependencia temporal permite la detección del modo de Rabi-Higgs de manera simple usando espectroscopías con resolución temporal como demostraremos en la siguiente sección.

Un nuevo fenómeno no lineal que no hemos discutido hasta el momento es la generación de segundos armónicos y el correspondiente Rabi-Higgs asociado en la respuesta dinámica del *gap*. En el caso de que el estímulo externo sea radiación electromagnética, la generación de segundos armónicos está prohibida por simetría [57]. Esto se deduce del hecho de que la respuesta de la corriente a un potencial vector A es $J \sim \rho_s(A)A$ donde $\rho_s(A)$ es la densidad de superfluido. En ausencia de una corriente estacionaria, la energía libre y $\rho_s(A)$ son funciones pares de A , de manera que la contribución no lineal a la corriente, de menor orden en A posible es $J \sim A^3$ (generación de terceros armónicos) [57]. Sin embargo, en nuestro caso, esta simetría no está presente pues para $\lambda > 0$, también los términos impares en $\delta\lambda$ son permitidos en la energía libre y como consecuencia es posible la existencia de segundos armónicos.

De hecho, como se observa en el panel inferior de la Fig. 5.1, la respuesta superconductora no solo contiene la frecuencia de la perturbación $\omega_d = 4\Delta_0$ sino también

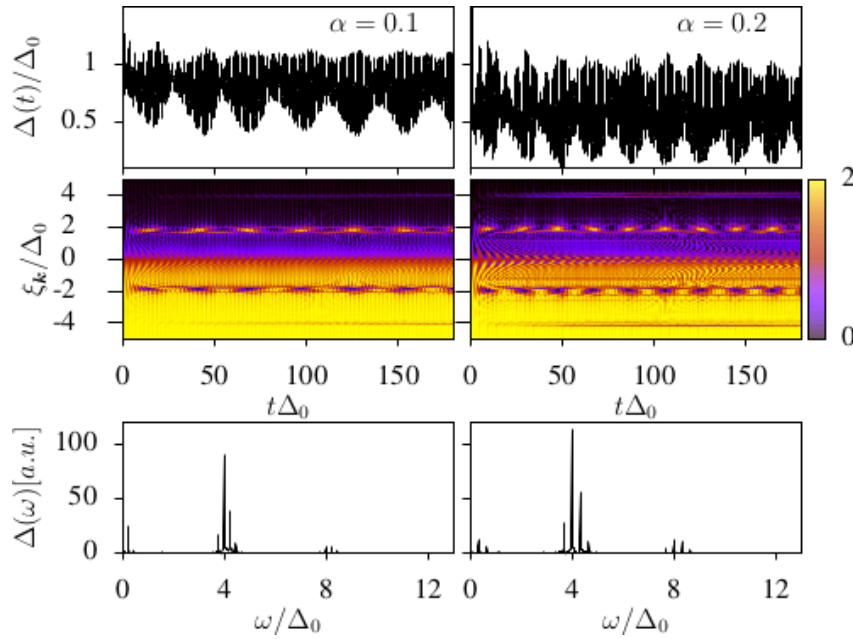


Figura 5.1: Respuesta dinámica del superconductor en ausencia de reservorio externo para $\alpha = 0.1$ (columna izquierda) y $\alpha = 0.2$ (columna derecha) con $\omega_d = 4\Delta_0$. Comenzando por el panel superior hasta el panel inferior se muestra el parámetro de orden superconductor como función del tiempo, la función distribución de momentos $n_k(t)$ y la transformada de Fourier de $\Delta(t)$ respectivamente.

el doble de la frecuencia $2\omega_d = 8\Delta_0$. Esto también se aprecia en el panel intermedio de la Fig. 5.1, donde oscilaciones de Rabi-Higgs mucho más lentas, asociadas con la respuesta de segundos armónicos es claramente visible como una estructura angosta dependiente del tiempo en la población de quasipartículas con $\xi_k \approx \pm 4\Delta_0$.

5.1.2. Dinámica incluyendo relajación de energía

En esta sección analizamos los efectos de disipación que introduce un baño térmico en la dinámica del parámetro de orden superconductor y en la distribución de quasipartículas.

Como mencionamos anteriormente, un resultado bien conocido en el campo de la óptica cuántica es que las oscilaciones de Rabi para un sistema de dos niveles resulta ser un efecto transitorio en presencia de mecanismos de relajación de energía. En la Fig. 5.2, se muestra la respuesta superconductora $\Delta(t)$ para distintos valores de γ y de la amplitud de la perturbación α . En este caso, encontramos que las oscilaciones de Rabi-Higgs se convierten también en un efecto transitorio solo apreciable antes de que el sistema alcance un estado estacionario debido al intercambio de energía con el baño. Luego para este caso particular de muchos sistemas de dos niveles sincronizados e interactuantes entre sí, se preserva la fenomenología de un sistema de dos niveles con un régimen transitorio de oscilaciones de Rabi y un estado estacionario en el cuál el parámetro de orden oscila solamente con la frecuencia

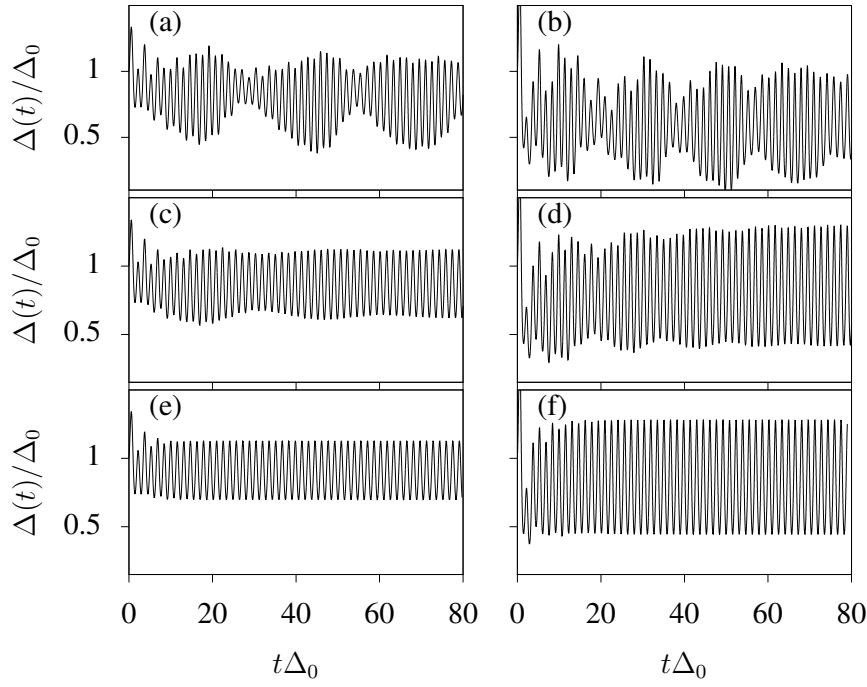


Figura 5.2: Dependencia temporal del parámetro de orden superconductor en presencia de un baño que introduce relajación de energía, para $\alpha = 0.1$ (columna izquierda) y $\alpha = 0.2$ (columna derecha). En el panel superior, intermedio e inferior usamos $\gamma = 0$ (en ausencia de baño), $\gamma = 0.05\Delta_0$ y $\gamma = 0.2\Delta_0$, respectivamente.

de la perturbación periódica.

En la medida que γ sea cada vez más grande (yendo del panel superior al inferior en la Fig. 5.2) el sistema alcanza un estado estacionario más rápidamente en el que las oscilaciones de Rabi-Higgs dejan de estar presentes. Al aumentar α , para un valor fijo de γ , ω_R aumenta y varias oscilaciones de Rabi-Higgs pueden ser vistas antes que desaparezcan completamente como consecuencia de la relajación de energía provista por el baño (ver por ejemplo Fig. 5.2 (c,d)). De esta forma, en aras de detectar experimentalmente los modos de Rabi-Higgs, es necesario garantizar que $\omega_R \gtrsim \gamma$. De hecho, esta es la razón por la cual, para los valores de γ que hemos utilizado hasta el momento, el modo de Rabi-Higgs más lento, asociado con la generación de segundos armónicos, no es visible en este caso (dicho período de Rabi-Higgs es mucho más largo que el tiempo característico de relajación de energía).

En el otro extremo, para α chicos y disipación fuerte es posible acceder a un régimen en el que $\omega_R \lesssim \gamma$ donde solo se observan oscilaciones sincronizadas con la frecuencia de la perturbación (paneles inferiores de Fig. 5.2 y Fig. 5.3). En este régimen, las amplitudes de las oscilaciones del parámetro de orden aumentan linealmente con α como se muestra en la Fig. 5.3. Sin embargo, es importante hacer notar que al incrementar el valor de α , después de un transitorio muy rápido, el parámetro de orden disminuye en promedio lo cual constituye el primer efecto no

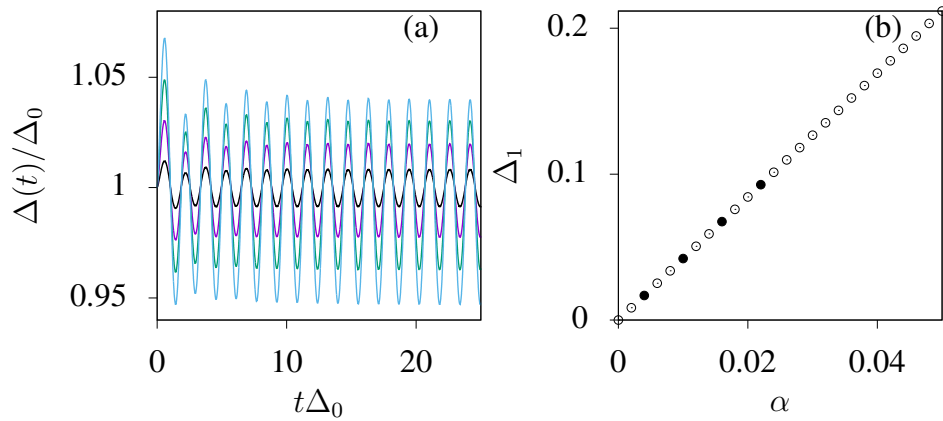


Figura 5.3: (a) Evolución temporal del parámetro de orden para $\gamma = 0.2\Delta_0$ y $\alpha = 0.004, 0.01, 0.016, 0.022$. (b) Amplitud Δ_1 de las oscilaciones del parámetro de orden en función de α . Los puntos negros corresponden con las curvas del panel (a).

lineal que aparece en la dinámica.

Como conclusión de estos primeros resultados, en presencia de disipación, podemos distinguir dos regímenes bien marcados: uno en el cual la teoría de respuesta lineal es aplicable aún a tiempos cortos ($\omega_R \lesssim \gamma$) y el otro que corresponde a un régimen transitorio de respuesta no lineal con oscilaciones de Rabi-Higgs ($\omega_R \gtrsim \gamma$). Notablemente, en el primer caso (cuando el efecto de relajación es más rápido que las oscilaciones de Rabi-Higgs) aparece un comportamiento no lineal en el estado estacionario para amplitudes de la perturbación suficientemente grandes. A continuación exploraremos ambos regímenes; el régimen de respuesta no lineal transitoria para $2\pi/\omega_R < t_M < 1/\gamma$, siendo t_M el tiempo en el que se mide, y el régimen no lineal en el estado estacionario para amplitudes grandes de la perturbación con $t_M > 1/\gamma$.

Comenzaremos discutiendo en detalle el régimen transitorio de respuesta no lineal, haciendo hincapié en la posibilidad de detectar los modos Rabi-Higgs experimentalmente. Previamente, hemos demostrado que el modo Rabi-Higgs está asociado con oscilaciones en los valores de ocupación n_k (ver Fig. 5.1). Estas fluctuaciones de carga constituyen la clave fundamental para detectar, de manera sencilla, la existencia de estos modos no lineales de oscilación usando técnicas experimentales estándares como se demostrará en la siguiente sección.

Dado que la estructura electrónica que hemos considerado a lo largo de la tesis es isotrópica en el espacio \mathbf{k} , n_k depende de \mathbf{k} solamente a través de la energía correspondiente (ξ_k) medida desde la superficie de Fermi. Por tanto es útil introducir una nueva notación para la función de distribución $n(\xi_k) \equiv n_k$. Cuando sea conveniente, en lo que sigue sacaremos la dependencia explícita en momento y nos referiremos a $n(\xi)$ como: la función de distribución de momento teniendo en mente la equivalencia antes mencionada.

En la Fig. 5.4 se observa la distribución n_k dependiente del tiempo teniendo en cuenta el acoplamiento con el reservorio (columna intermedia y derecha) en comparación con su contraparte en ausencia de interacción con el baño (columna izquierda) para diferentes instantes de tiempo dentro del primer ciclo de Rabi (paneles (d)-(f)) así como en el estado estacionario (paneles (a)-(c)). Los parámetros γ y α que hemos usado son los mismos que se usaron en la columna derecha de la Fig. 5.2.

Para $\gamma = 0$, las oscilaciones de Rabi pueden ser identificadas como oscilaciones en el valor de ocupación n_k con $\xi_k \approx \pm 2\Delta_0$, que denotaremos como $n(\pm\xi_R)$. Pequeños picos aparecen también para $\xi_k \approx \pm 4\Delta_0$, correspondiendo al modo Rabi-Higgs lento asociado a la generación de segundos armónicos el cual comienza a desarrollarse en la escala temporal utilizada en la Fig. 5.4(d). A tiempos largos, los dos modos Rabi-Higgs pueden ser vistos como se deduce de la Fig. 5.4(a).

Para el caso en el que la disipación es débil ($\gamma = 0.05\Delta_0$), la dinámica transitoria solamente muestra oscilaciones de $n(\pm\xi_R)$ que corresponden con el modo Rabi-Higgs de más alta frecuencia. Finalmente, cuando la disipación es fuerte (acoplamiento fuerte entre el superconductor y el baño: $\gamma = 0.2\Delta_0$) no alcanza a completarse un ciclo de Rabi debido a que el mecanismo de relajación de energía actúa a tiempos muy cortos comparados con el período del modo Rabi-Higgs. Como consecuencia, $n(\xi_R)$ ($n(-\xi_R)$) aumenta (disminuye) en un intervalo de tiempo corto y luego satura rápidamente sin mostrar oscilaciones de Rabi.

La distribución de momento en el estado estacionario se muestra en la Fig. 5.4(b) y Fig. 5.4(c) para distintos tiempos dentro de un período de la perturbación. En este caso, n_k tiene un pico a $\xi_k \approx \pm 2\Delta_0$ tal que $n(\pm\xi_R) \approx 1$ durante toda la dinámica. Teniendo en cuenta el grado de libertad de espín, este estado corresponde a un estado de partícula libre semi-lleno. Como veremos enseguida, el valor de $\alpha = 0.2$ que hemos considerado es suficientemente grande como para alcanzar un régimen no lineal en el estado estacionario. De esta forma, en presencia de mecanismos de relajación, la dinámica del parámetro de orden superconductor tarde o temprano llega a un régimen en el cual solo aparece la frecuencia de la perturbación (ver Fig. 5.2 (e,f)) y existe un desbalance estacionario de la población de cuasipartículas a la energía ξ_R .

Ahora nos concentramos en el régimen estacionario con el objetivo de identificar como es la transición entre la respuesta lineal y no lineal. Para ello hemos extraído la distribución de cuasipartículas n_k a tiempos largos para distintos valores de α con $\gamma = 0.2\Delta_0$. El desbalance de la población de cuasipartículas en el estado estacionario cambia considerablemente como función de la amplitud de la perturbación como se observa en la Fig. 5.5. Este fenómeno es bien conocido en el marco de la óptica cuántica, en donde uno considera usualmente un sistema de dos niveles en presencia de una perturbación externa dependiente del tiempo y efectos de disipación a

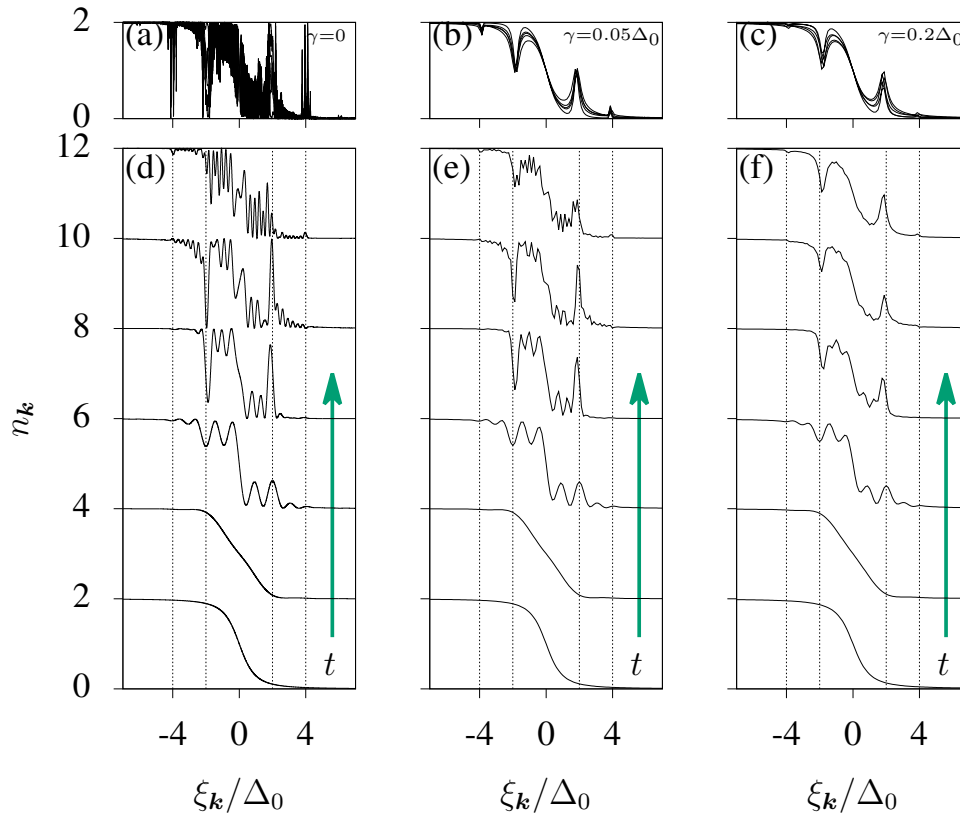


Figura 5.4: Distribución n_k en función del tiempo para $\alpha = 0.2$ y $\gamma = 0$ (columna izquierda), $\gamma = 0.05\Delta_0$ (columna intermedia) y $\gamma = 0.2\Delta_0$ (columna derecha). En los paneles (d)-(f) se muestra el n_k para distintos instantes de tiempo: el tiempo aumenta de abajo hacia arriba en cada figura como $t = 0$ (equilibrio), $t = 0.1\tau_R$, $t = 0.25\tau_R$, $t = 0.5\tau_R$, $t = 0.75\tau_R$ y $t = \tau_R$ (período de Rabi-Higgs: $\tau_R\Delta_0 = 15$). Para mayor claridad, el cero de cada curva ha sido desplazado verticalmente por un factor 2. Las distribuciones n_k para distintos tiempos dentro de un período de la perturbación, en el estado estacionario, puede verse en los paneles (a)-(c).

través de un parámetro fenomenológico en las ecuaciones de movimiento (ecuaciones de Bloch). Si la perturbación está en resonancia con el sistema de dos niveles (la frecuencia de la excitación coincide con el espaciamiento entre los dos niveles de energía), la población del estado excitado en el estado estacionario, aumenta con la amplitud de la perturbación y en el límite de intensidades muy altas, la población más grande posible de dicho estado es igual a la población del estado básico del sistema (ambos niveles se encuentran igualmente poblados) [152].

Como ya hemos mencionado, la situación para el caso de un superconductor BCS, es en principio bien distinta al caso de un sistema de dos niveles en el marco de la óptica cuántica. En este caso, el fenómeno observado no corresponde a la dinámica de un sistema de dos niveles sino a una colección de sistemas de dos niveles interactuando a través de la autoconsistencia que determina el parámetro de orden superconductor. A pesar de ello, en el límite de α grande (Fig. 5.5(e)) la población de cuasipartículas en resonancia con la perturbación satura al valor $n(\xi_R) \approx 1$ (estado semilleno teniendo en cuenta el espín) en el estado estacionario. En otras palabras,

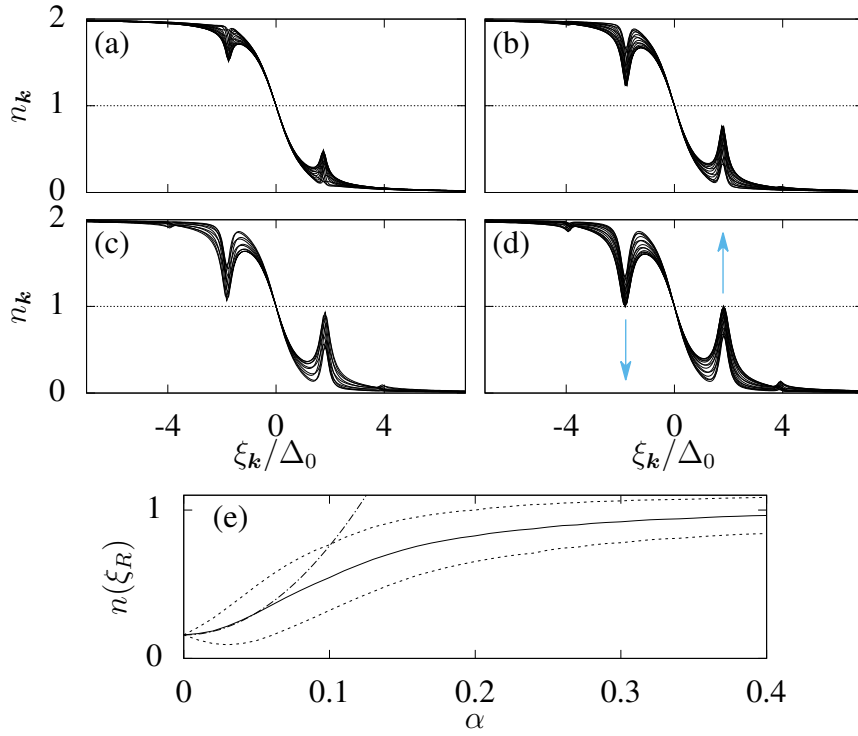


Figura 5.5: Distribuciones n_k en el estado estacionario para $\gamma = 0.2\Delta_0$ y $\alpha = 0.05$ (a), $\alpha = 0.1$ (b), $\alpha = 0.15$ (c) y $\alpha = 0.2$ (d). En el panel (e) las líneas discontinuas y línea continua representan el (mínimo, máximo) y promedio de $n(\xi_R)$, respectivamente, como función de α . Note que $n(\xi_R)$ es distinto de cero aún cuando $\alpha = 0$ debido al exceso de ocupación inherente al estado fundamental del hamiltoniano BCS. La línea discontinua y punteada es un ajuste cuadrático de la población excitada para pequeños valores de α . La inversión de la población comienza cuando $n(\xi_R)$ excede la línea horizontal $n_k = 1$ lo cual ha sido representado con flechas en el panel (d). Como consecuencia de la presencia de disipación, en el estado estacionario esto no ocurre por grande que sea la amplitud de la perturbación.

igual que como ocurre en un sistema de dos niveles, no es posible una inversión de población en el estado estacionario por grande que sea la amplitud de la perturbación α (la cantidad $n(\xi_R) - n(-\xi_R)$) no cambia de signo).

Dicho resultado muestra como las no linealidades dinámicas de un superconductor BCS pueden ser controladas de modo similar al caso de un sistema de dos niveles. Haciendo uso de esta analogía, el régimen de respuesta lineal debe estar caracterizado por elementos no diagonales de la matriz densidad que dependen linealmente de α y elementos diagonales que dependen de α cuadráticamente (como debe ser por razones de simetría). Este es el comportamiento que se observa en el caso de un superconductor BCS fuera de equilibrio en presencia de relajación de energía. Se puede ver como, para valores chicos de α , el promedio del desbalance en la población de cuasipartícula en resonancia con la perturbación crece cuadráticamente con α . Alrededor de $\alpha \sim 0.1$ este régimen desaparece y el sistema transiciona a un régimen no lineal en el estado estacionario. De esta forma, para garantizar un régimen de respuesta lineal es necesario que $\alpha \ll 1$ o $\omega_R \ll \Delta_0$ [contrastar con la Ec. (4.34)].

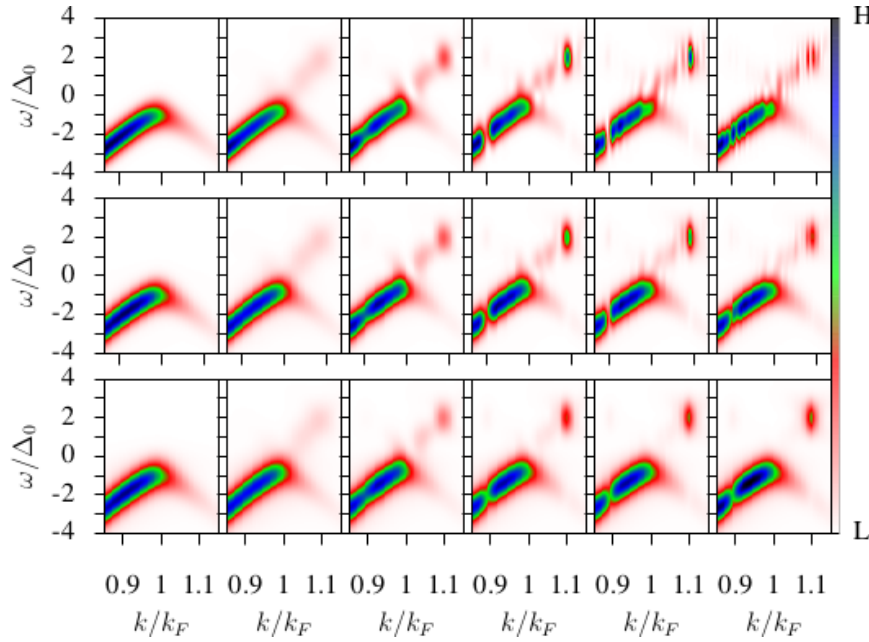


Figura 5.6: Fotocorriente detectada usando tr-ARPES para $\alpha = 0.2$ a distintos tiempos de foto-emisión dentro del primer período de Rabi-Higgs τ_R . De izquierda a derecha, utilizamos $t_0 = 0$ (equilibrio), $t_0 = 0.1\tau_R$, $t_0 = 0.25\tau_R$, $t_0 = 0.5\tau_R$, $t_0 = 0.75\tau_R$ y $t_0 = \tau_R$ respectivamente. El panel superior, intermedio e inferior corresponden a $\gamma = 0$ (en ausencia del baño), $\gamma = 0.05\Delta_0$ y $\gamma = 0.2\Delta_0$ como en la Fig. 3.6.

5.2. Simulación de tr-ARPES y STM: detección del modo Rabi-Higgs y otras no linealidades en el estado estacionario

El principal objetivo en esta sección es, identificar cuales son las características que aparecen usando espectroscopías resueltas en tiempo, que permiten identificar la existencia de oscilaciones de Rabi-Higgs como un efecto transitorio y la presencia de no linealidades en el estado estacionario.

Claramente, una técnica emergente para detectar fenómenos transitorios en una pequeña escala de tiempo en sistemas de materia condensada es tr-ARPES que será discutido a continuación. En una segunda parte, demostraremos como experimentos de tunelaje con resolución temporal podrían ser útiles también para detectar todas estos comportamientos no lineales fuera de equilibrio.

En todos los casos que discutiremos a continuación, calculamos la señal espectral correspondiente en términos de la función de Green menor Ec. (3.40) como función de α y γ .

5.2.1. tr-ARPES

En nuestra configuración, $\lambda(t)$ comienza a actuar en el sistema al tiempo $t = 0$ lo cual produce comportamientos no lineales fuera de equilibrio en el superconductor que quieren ser detectados. En el caso de tr-ARPES la respuesta dinámica fuera de equilibrio es sensado mediante un proceso de fotoemisión inducido por un paquete de ondas de fotones centrados en el tiempo t_0 y con energía central $\hbar\omega_q$ más grande que la función trabajo del sólido W . Para simplificar, utilizamos una forma gaussiana para este pulso de sondeo

$$s(t) = \exp(-(t - t_0)^2/2\sigma^2)/(\sigma\sqrt{2\pi}) \quad (5.6)$$

con desviación estándar σ . En un experimento tr-ARPES, se mide el impulso de los electrones salientes \mathbf{k}_e . La conservación de energía determina la energía de excitación que queda en el sistema después del proceso de fotoemisión, $\hbar\omega = \hbar\omega_q - (\hbar k_e)^2/(2m_e) - W$ y la conservación del momento proporciona información sobre el impulso de las excitaciones \mathbf{k} . La fotocorriente resuelta en momento que se observa en el detector al tiempo t se debe a todos los electrones fotoemitidos antes de dicho tiempo lo cual viene determinado por la expresión

$$I_{\mathbf{k}}(\omega, t) = \text{Im} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^t dt_2 s(t_1) s(t_2) e^{i\omega(t_1-t_2)} \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t_1, t_2)_{11} . \quad (5.7)$$

Con el objetivo de sensar los modos Rabi-Higgs en tiempo real, en lo que sigue estudiaremos como cambia la fotocorriente detectada para distintos tiempos de fotoemisión t_0 tomando el límite de integración entre un tiempo de corte inferior $t_i = t_0 - 5\sigma$ y $t = t_0 + 5\sigma$ (teniendo en cuenta todos los electrones fotoemitidos por el pulso de sondeo). En la Fig. 5.6 se ha graficado $I_{\mathbf{k}}(\omega, t)$ para el problema con y sin acoplamiento al baño externo para distintos instantes t_0 dentro del primer período de Rabi-Higgs τ_R . Por simplicidad y sin pérdida de generalidad, consideramos una banda parabólica para los electrones $\xi_{\mathbf{k}} \propto (k^2 - k_F^2)$ y un pulso de sondeo con desviación estándar $\sigma = 0.1\tau_R$. La señal de fotoemisión en equilibrio (columna izquierda de la Fig. 5.6), muestra un ensanchamiento de la línea espectral para los distintos valores de γ lo cual como vimos en el capítulo 2 hace disminuir el parámetro de orden superconductor de acuerdo con la fórmula Ec. (5.1).

La presencia de oscilaciones de Rabi-Higgs es claramente visible en los paneles superior e intermedio de la Fig. 5.6 asociada a un peso espectral alrededor de $\omega = \pm 2\Delta_0$ que aumenta (disminuye) por encima (debajo) del nivel de Fermi en la mitad del primer período y tiene el comportamiento opuesto en la segunda mitad del período de Rabi-Higgs. Uno puede visualizar el proceso como una excitación de las cuasipartículas desde la banda inferior del espectro de cuasipartícula a la banda

superior en el primer medio ciclo, seguido de una desexcitación en el segundo medio ciclo (como una fase de absorción estimulada seguida de una fase de emisión estimulada).

Si γ es lo suficientemente grande, las oscilaciones de Rabi no son visibles y solo se observa el peso espectral correspondiente al estado estacionario después de un transitorio rápido (panel inferior de la Fig. 5.6).

Claramente, la dinámica del espectro de fotoemisión está relacionada con el desequilibrio de la función de distribución de momento discutido anteriormente. De hecho, integrando en frecuencia la señal de fotoemisión uno obtiene que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} I_{\mathbf{k}}(\omega, t) &= \text{Im} \int_{-\infty}^t dt' s(t')^2 \mathbf{G}_{\mathbf{k}}^<(t', t')_{11} \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^t dt' s(t')^2 n_{\mathbf{k}}(t') \end{aligned} \quad (5.8)$$

lo cual es claramente un promedio móvil de $n_{\mathbf{k}}(t)$. Por ejemplo, en el caso de γ grande, el desequilibrio en la señal de tr-ARPES como función del tiempo para $\omega = \pm 2\Delta_0$ está en total acuerdo con la distribución $n_{\mathbf{k}}$ en el estado estacionario que se muestra en la Fig. 5.5(d).

Estos resultados muestran, rigurosamente, cómo experimentos de fotoemisión con resolución temporal podrían ser una excelente herramienta para investigar no linealidades en el estado estacionario tales como la saturación en el desbalance de la población de cuasipartículas, y las no linealidades transitorias (modo Rabi-Higgs), en superconductores BCS en presencia de perturbaciones periódicas en el tiempo.

5.2.1.1. Teoría de Floquet para el estado estacionario

Como ya se mencionó, para $t \gtrsim \mathcal{T} = 1/\Gamma$, el sistema alcanza un estado estacionario y el parámetro de orden superconductor oscila solo con la frecuencia de la perturbación. En este caso, el hamiltoniano de campo medio es periódico en el tiempo y podemos usar el teorema de Floquet para analizar el espectro de excitaciones. Este teorema garantiza la existencia de un conjunto de soluciones de la ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo de la forma

$$|\psi_{\nu}(t)\rangle = \exp(-i\varepsilon_{\nu}t/\hbar) |\phi_{\nu}(t)\rangle \quad (5.9)$$

donde $|\phi_{\nu}(t)\rangle$ tiene la misma periodicidad que el hamiltoniano [156, 157]. Los estados de Floquet $|\phi_{\nu}(t)\rangle$ son las soluciones de la ecuación

$$\mathcal{H}_F |\phi_{\nu}(t)\rangle = \varepsilon_{\nu} |\phi_{\nu}(t)\rangle \quad (5.10)$$

donde $\mathcal{H}_F = H_{MF} - i\hbar\partial/\partial t$ es el hamiltoniano de Floquet y ε_ν es la cuasienergía [158, 159]. En la base de Floquet, dicho hamiltoniano se convierte en un operador matricial independiente del tiempo de dimensión infinita. Dado que estamos interesados en el espectro de bajas cuasienergías restringimos el hamiltoniano de Floquet a un subespacio suficientemente grande pero finito que contiene muchos procesos multi-fotónicos (número finito de réplicas) [158, 159]. La convergencia del espectro para cuasienergías bajas ha sido garantizado aumentando el número de réplicas hasta conseguir que el error en el cálculo de bandas de Floquet sea por debajo de 10^{-8} .

Para $\gamma = 0.2\Delta_0$ y $\alpha = 0.2$ el estado estacionario se alcanza aproximadamente para $t \sim 0.75\tau_R = 11.25/\Delta_0$. El espectro de cuasienergías en el límite de tiempos largos está bien descrito usando un $\Delta(t) = \bar{\Delta} + \Delta_1 \cos(\omega_d t)$ donde $\bar{\Delta} = 0.86\Delta_0$ y $\Delta_1 = 0.42\Delta_0$ que reproduce perfectamente la dinámica superconductora correspondiente [ver Fig. 3.6(f)].

En los paneles superiores de la Fig 5.7 comparamos la señal de tr-ARPES con el espectro de Floquet en el estado estacionario. Para analizar los detalles, en los paneles de la derecha sacrificamos un poco de resolución temporal para obtener una mejor resolución en energía utilizando un pulso de sondeo más ancho. Vemos que la señal tr-ARPES coincide muy bien con el espectro de Floquet, representado por líneas discontinuas en la Fig 5.7. Por lo tanto, la señal tr-ARPES sondea esencialmente la ocupación de la estructura de bandas de Floquet.

Sorprendentemente, también en la dinámica transitoria, la intensidad de tr-ARPES encaja muy bien con un espectro de Floquet que se obtiene usando un $\Delta(t)$ efectivo con una dependencia monocromática (ver el panel inferior de la Fig. 5.7), incluso cuando en este régimen, la dinámica del parámetro de orden superconductor muestra varias frecuencias inconmensurables (Rabi-Higgs y frecuencia de la perturbación) y el teorema de Floquet no es estrictamente aplicable. Para $\gamma = 0$, calculamos el espectro de Floquet teniendo en cuenta un $\Delta(t) = 0.63\Delta_0 + 0.35\Delta_0 \cos(\omega_d t)$. De esta forma, la respuesta transitoria que se muestra en la Fig. 5.6 y los paneles inferiores de la Fig. 5.7 puede verse como un cambio en la ocupación de la estructura de banda de Floquet como función del tiempo. Claramente, la razón por la que este análisis funciona en el régimen de oscilaciones de Rabi-Higgs, es la gran separación de escalas de tiempo que existe entre la dinámica lenta de Rabi-Higgs y las oscilaciones rápidas de la perturbación [160].

5.2.2. Experimentos de tunelaje con resolución temporal

En esta sección discutiremos otra alternativa para detectar los modos de Rabi-Higgs y no linealidades en el estado estacionario mediante experimentos de trans-

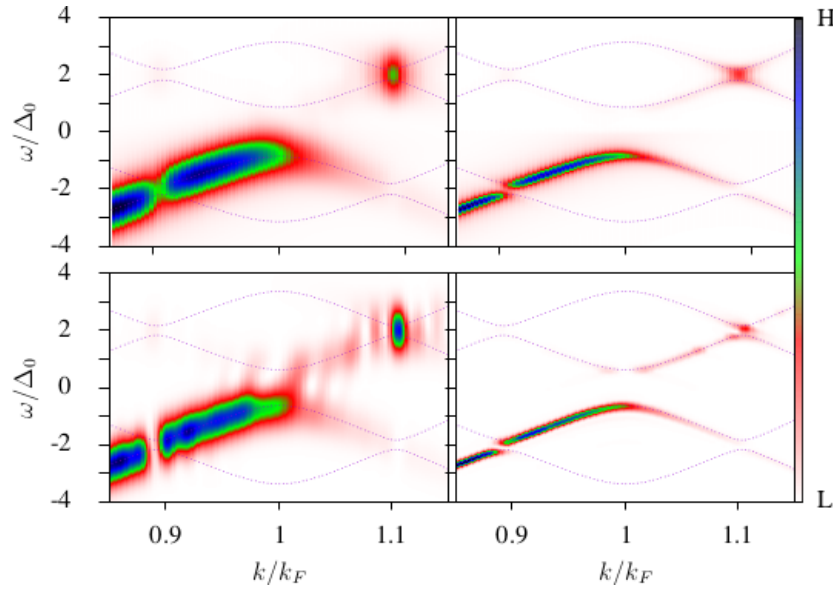


Figura 5.7: Señal de tr-ARPES para $\alpha = 0.2$, $t_0 = 0.75\tau_R$ y $\gamma = 0.2\Delta_0$ (panel superior) y $\gamma = 0$ (panel inferior). Usamos un pulso de sondeo con desviación estándar $\sigma = 0.1\tau_R$ (columna izquierda) y $\sigma = 0.6\tau_R$ (columna derecha). Las líneas discontinuas corresponden al espectro de cuasienergías de Floquet suponiendo una dependencia temporal $\Delta(t)$ periódica definida en el texto para cada caso.

porte. En las últimas décadas ha habido un gran interés científico y tecnológico en el posible aumento de la resolución temporal de técnicas tales como la microscopía de efecto túnel (STM) alcanzándose resoluciones por debajo de la escala de los picosegundos en algunas configuraciones experimentales de avanzada [161–163]. Muy recientemente, ha sido posible conseguir resolución temporal incluso por debajo de los femtosegundos unido a una resolución espacial por debajo del angstrom para estudiar fenómenos fuera de equilibrio con STM [164]. Dicho trabajo ha demostrado que puede usarse el STM como una poderosa técnica con resolución temporal en el orden de los attosegundos (10^{-18} s). En este tipo de espectroscopía, uno puede radiar la muestra mientras realiza las mediciones, y puede ser usada del mismo modo que las espectroscopías ópticas de *pump & probe* usuales [163].

Dado que la resolución espacial no es un requerimiento para la observación de las no linealidades del sistema fuera de equilibrio halladas anteriormente, una posibilidad es pensar en una juntura plana lo cual es una configuración más estable. En este caso, el problema es cómo hacer incidir la radiación a través de la juntura. Una antena puede ser utilizada para acoplar la radiación al superconductor del mismo modo que ha sido implementado en detectores de fotones [165, 166]. En lo que sigue, haremos alusión al caso del STM pero nuestro formalismo puede ser aplicado también al problema de una juntura plana.

Para obtener la señal STM, consideraremos la presencia de una punta metálica muy cerca del superconductor fuera de equilibrio que se acopla localmente a los estados k del sistema. El problema completo puede ser descrito por un hamiltoniano

genérico $H = H_{\text{MF}} + H_{\text{T}} + H_{\text{TS}}$ donde hemos añadido, al hamiltoniano del superconductor en campo medio dependiente del tiempo H_{MF} , el hamiltoniano de la punta (o el contacto metálico)

$$H_{\text{T}} = \sum_{\mathbf{p}} (\epsilon_{\mathbf{p}} + eV) a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}}, \quad (5.11)$$

y el acoplamiento entre ambos subsistemas a través del hamiltoniano de tunelaje

$$H_{\text{TS}} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \left(T_{\mathbf{k}\mathbf{p}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}} + h.c. \right). \quad (5.12)$$

La punta está conectada a un fuente de voltaje externa de energía eV , $a_{\mathbf{p}}$ ($a_{\mathbf{p}}^{\dagger}$) es el operador de destrucción (creación) de un electrón con momento \mathbf{p} y energía $\epsilon_{\mathbf{p}} + eV$ en la punta y $T_{\mathbf{k}\mathbf{p}}$ es la constante de acoplamiento entre ambos subsistemas. El operador corriente de electrones viene dado por

$$\hat{I} = ie \left[\hat{N}, \hat{H} \right] = ie \left(\hat{L}^{\dagger} - \hat{L} \right), \quad (5.13)$$

donde e es la carga del electrón, $\hat{N} = \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}}$ es el operador número y $\hat{L} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} T_{\mathbf{k}\mathbf{p}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{p}}$. Suponiendo que el acoplamiento entre la punta y el superconductor es suficientemente chico, aplicamos la teoría de respuesta lineal en H_{TS} . De esta forma, la corriente que pasa a través de la punta viene dada por

$$I(t) = ie \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t - t') \left\langle \left[\hat{I}(t), H_{\text{TS}}(t') \right] \right\rangle_0 \quad (5.14)$$

donde $\langle \dots \rangle_0$ denota el valor de expectación a orden cero en el hamiltoniano de tunelaje H_{TS} . Nótese que, hasta el momento, no hemos considerado el grado de libertad de espín pues, en este caso, la corriente es una cantidad que conserva el espín del electrón (no están permitidos procesos en los que el electrón cambia su espín durante el proceso de tunelaje). La contribución a la corriente que viene del grado de libertad de espín puede ser incluida en la expresión final agregando un factor 2 (la corriente es la misma para espín *up* o espín *down*). De la Ec. (5.14) se obtiene que

$$\begin{aligned} I(t) = & 2eT^2 \int_{-\infty}^t dt' \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \left(\left[e^{-i\epsilon_{\mathbf{p}}(t-t')} \left\langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t) c_{\mathbf{k}}(t') \right\rangle \Theta(\epsilon_{\mathbf{p}} - eV) \right. \right. \\ & \left. \left. - e^{i\epsilon_{\mathbf{p}}(t-t')} \left\langle c_{\mathbf{k}}(t) c_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t') \right\rangle \Theta(-\epsilon_{\mathbf{p}} + eV) \right] + (t \leftrightarrow t') \right) \end{aligned} \quad (5.15)$$

suponiendo que el acoplamiento entre los subsistemas es una cantidad constante independiente del momento $T_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \equiv T$ y teniendo en cuenta que la ocupación de los electrones en la punta viene dada por una función de distribución de Fermi a temperatura cero a través de la función escalón de Heaviside $\Theta(x)$. Tomando la

derivada respecto al voltaje V en ambos miembros de la Ec. (5.15) y usando la definición de la funciones de Green en el formalismo de Keldysh (ver capítulo 2), la conductancia diferencial dependiente del tiempo puede ser escrita como

$$G(t) = \frac{dI}{dV} \propto \text{Im} \sum_k \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} [G_k^<(t, t')] e^{-ieV(t-t')} \quad (5.16)$$

donde Tr representa la traza en el espacio de Nambu. En ausencia de perturbación dependiente del tiempo (en equilibrio) la conductancia diferencial se vuelve independiente del tiempo y resulta ser proporcional a la fórmula fenomenológica de Dynes de la densidad de estados

$$G \propto \rho(eV) = \rho_0 \text{Re} \left[\frac{eV + i\Gamma}{\sqrt{(eV + i\Gamma)^2 - \Delta_0^2}} \right], \quad (5.17)$$

donde, en este caso, el parámetro de Dynes es $\Gamma = \gamma/2$, Δ_0 es el parámetro de orden en equilibrio y ρ_0 es la densidad de estados en la fase normal. Vale la pena recordar que la fórmula de Dynes se introdujo originalmente desde un punto de vista fenomenológico lo cual ha sido justificado formalmente en el capítulo 2 teniendo en cuenta cierto proceso de relajación de energía [98, 167]. Volviendo al caso del problema dependiente del tiempo, para valores pequeños de γ , el cálculo de la conductancia diferencial fuera de equilibrio es computacionalmente muy exigente ya que hay que integrar *toda* la dinámica previa en la Ec. (5.16), distinto al caso de fotoemisión donde los límites de integración están acotados por la forma del pulso de sondeo. Es por ello que, para hacer factibles los cálculos, usamos los parámetros $\gamma = 0.2\Delta_0$ y $\alpha = 0.1$. El período nominal de Rabi-Higgs, en este caso, corresponde a $\tau_R\Delta_0 \approx 27$, pero debido a la disipación fuerte que proporciona el acoplamiento con el baño externo, en este caso se alcanza un estado estacionario antes de que se complete un ciclo completo de Rabi. No obstante, como se muestra en la Fig. 5.8, la conductancia diferencial dependiente del tiempo muestra claramente una dinámica transitoria no trivial. De hecho, se puede observar una clara depresión en la conductancia diferencial alrededor de $eV = 2\Delta_0$ como función del tiempo que está asociada al comienzo de las oscilaciones de Rabi-Higgs.

Como en el caso de la fotoemisión, dos efectos determinan las características de la señal espectroscópica. Uno viene del hecho de que las bandas de Bogoliubov superior e inferior se hibridizan con la primera réplica de Floquet de las bandas de Bogoliubov inferior y superior, respectivamente, creando un *pseudogap* a $\pm\omega_d/2$ (ver columna derecha de la Fig 5.7) y una pérdida de peso espectral como consecuencia. Además, la depresión de la población de cuasipartículas a la energía $-\omega_d/2$ disminuye la probabilidad de extraer electrones y el exceso de población a la energía

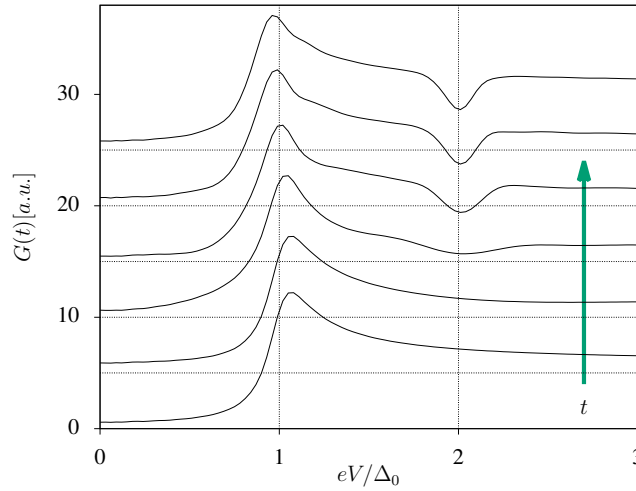


Figura 5.8: Conductancia diferencial para $\alpha = 0.1$ para distintos instantes de tiempo dentro del primer período τ_R del modo Rabi-Higgs, de abajo hacia arriba las distintas curvas corresponden con $t = 0$ (equilibrio), $t = 0.1\tau_R$, $t = 0.25\tau_R$, $t = 0.5\tau_R$, $t = 0.75\tau_R$ y $t = \tau_R$. Hemos usado $\gamma = 0.2\Delta_0$ y el cero (líneas discontinuas horizontales) de cada una de las curvas ha sido desplazado en un factor 5 para hacer más clara la figura.

$\omega_d/2$ prohíbe la inyección de electrones debido al bloqueo de Pauli. Estos dos efectos combinados son los responsables de la depresión en la conductancia diferencial como función del tiempo.

Otro efecto de la perturbación periódica es que se modifica toda la forma de la conductancia a bajos voltajes. Debido a los mecanismos de relajación, en el equilibrio la conductancia diferencial no va a cero abruptamente para energías por debajo de Δ_0 . Una vez que se prende la perturbación periódica dependiente del tiempo, el pico de coherencia superconductor disminuye de acuerdo con la disminución del parámetro de orden promedio que se observa en la respuesta dinámica del parámetro de orden superconductor.

5.3. Resumen

En este capítulo hemos estudiado la dinámica de un superconductor BCS sujeto a un accionamiento periódico en presencia de disipación provista por un baño térmico. Hemos analizado en detalle los posibles fenómenos no lineales que aparecen. Un efecto importante que introduce dicha disipación es el hecho de que las oscilaciones de Rabi-Higgs, discutidas previamente para el caso $\gamma = 0$, se convierten en un fenómeno transitorio y requieren que $\gamma \lesssim \omega_R$ para que puedan ser observadas experimentalmente. A tiempos largos ($t \gtrsim 1/\gamma$), se obtiene un régimen de respuesta lineal para pequeñas amplitudes de la perturbación (para $\omega_R \ll \Delta_0$), mientras que para amplitudes de la perturbación suficientemente grandes se obtienen no linealidades en el estado estacionario tales como el fenómeno de saturación del desba-

lance de la población de cuasipartículas. Otra interesante no linealidad demostrada en este capítulo es la generación de segundos armónicos y la existencia de un nuevo modo Rabi-Higgs asociado. Debemos señalar que, excepto por este último resultado de generación de segundos armónicos, el resto de las no linealidades discutidas deben estar presentes también usando otros tipos de perturbaciones periódicas (DOS periódica en el tiempo, radiación en el rango de los THz, excitaciones ópticas, etcétera).

El sistema que hemos estado analizando (superconductor BCS en presencia de perturbaciones periódicas) es muy diferente a un único sistema de dos niveles en presencia de radiación. De hecho, las oscilaciones de Rabi-Higgs son oscilaciones colectivas que involucran una fracción finita de sistemas de dos niveles gracias a las interacciones entre ellos, lo cual induce sincronización en el sistema. A pesar de eso, existe una estrecha analogía con los regímenes no lineales de un solo sistema de dos niveles lo cual establece una nueva estrategia para explorar protocolos bien conocidos de óptica cuántica llevados a un nivel colectivo y de sincronización con el objetivo de encontrar mecanismos de control y manipulación del estado superconductor de los materiales. Hemos identificado dos regímenes no lineales bien marcados: un régimen transitorio a tiempos cortos en sistemas con largos tiempos de relajación y un régimen no lineal en el estado estacionario.

Es común considerar los "efectos transitorios" como fenómenos irrelevantes, sin embargo se debe tener en cuenta que prácticamente todas las tecnologías cuánticas modernas se basan en fenómenos transitorios no lineales que tienen lugar en una escala de tiempo menor que los tiempos de decoherencia, por lo que su importancia no puede ser subestimada.

La detección experimental de estos comportamientos altamente no lineales en superconductores BCS fuera de equilibrio podría ser un paso importante hacia el control cuántico y la manipulación de dichos sistemas. En este sentido, hemos demostrado como técnicas espectroscópicas con resolución temporal tales como tr-ARPES y STM son útiles para detectar oscilaciones de Rabi-Higgs y no linealidades en el estado estacionario en presencia de disipación provista por un baño térmico. La resolución temporal requerida para estos experimentos no es necesariamente alta y dependerá de cuánto sea el tiempo de relajación fuera de equilibrio que limita las oscilaciones Rabi más lentas que se pueden ver. Suponiendo un período Rabi-Higgs del orden de $10^2/\Delta_0$, en películas delgadas superconductoras de aluminio esto corresponde a ~ 0.1 ns aproximadamente, que es órdenes de magnitud más grande que la resolución temporal estándar de tr-ARPES (típicamente ~ 300 fs o en algunos casos incluso ~ 30 fs). Este período es también mucho más grande que la resolución temporal por debajo de los picosegundos [161–163] y por debajo de los femtosegundos [164] logradas en algunos experimentos de STM con resolución temporal.

En tr-ARPES, la población de cuasipartículas excitadas aparece como una disminución (aumento) en la intensidad de la fotoemisión a la energía $-\omega_d/2$ ($+\omega_d/2$) medida a partir del potencial químico. Para el modo Rabi-Higgs, este desbalance de la población cambiará cíclicamente, mientras que para el régimen no lineal en el estado estacionario debería estabilizarse en una distribución compatible con el desbalance de la población de cuasipartículas observada en la función de distribución de momento (Fig 5.5) según la Ec. (5.8). En el último caso, la resolución temporal, por supuesto, no sería un problema.

Sorprendentemente, hemos demostrado que las señales tr-ARPES coinciden muy bien con un espectro Floquet no solo en el régimen de estado estacionario sino también en la dinámica transitoria. La intensidad de la señal de STM debe mostrar, de modo transitorio, una depresión cíclica dependiente del tiempo a la energía $\pm\omega_d/2$ debido a la falta de densidad espectral y el desbalance cíclico de la población que provoca bloqueo de Pauli y que está asociada a la presencia de oscilaciones de Rabi-Higgs. Esta anomalía debería estabilizarse a un valor reducido a tiempos largos como una característica distintiva del comportamiento no lineal en el estado estacionario. La detección experimental de esta no linealidad en el estado estacionario, sería de interés siendo de más fácil acceso experimental pues no requiere una alta resolución temporal.

En el capítulo anterior propusimos un mecanismo, para inducir la modulación periódica de la interacción atractiva asistida por fonones en la fase superconductora del FeSe el cual representa un posible candidato para explorar todos los fenómenos no lineales discutidos aquí. La idea principal es excitar un modo A_{1g} (oscilaciones de los Se) que controla la interacción atractiva. Teniendo en cuenta un pulso de luz infrarroja con valores de fluencia típicos, los parámetros α estimados en este caso son menores a 0.1 (ver capítulo anterior). En este capítulo utilizamos valores ligeramente mayores con el objetivo de explorar las no linealidades en el estado estacionario. Por otro lado, la modulación periódica de la interacción atractiva también puede ser implementada en sistemas atómicos ultrafríos como hemos mencionado anteriormente. En este caso, se podrían explorar valores más grandes de α sin mayores dificultades.

El formalismo que hemos empleado en este capítulo (y en el capítulo 2) puede extenderse fácilmente para tener en cuenta mecanismos de relajación de diversa naturaleza utilizando las autoenergías correspondientes las cuales pueden ir más allá de la aproximación de banda ancha para el baño que hemos estado considerando. Una dirección interesante es analizar qué tan robusto es el modo Rabi-Higgs en presencia de fuentes de desfase, decoherencia y relajación interna considerando interacciones residuales de Coulomb y electrón-fonón donde los efectos de calentamiento podrían ser relevantes.

Conclusiones generales y trabajo futuro

En una primera etapa de esta tesis, se hizo un repaso de los resultados más relevantes del modelo más estudiado de superconductividad fuera de equilibrio: el problema de un cambio súbito de la interacción atractiva en un superconductor BCS. En el segundo capítulo hemos generalizado este modelo para tener en cuenta efectos de relajación de energía debido a la presencia de un baño térmico. Para ello elaboramos un método, basado en el formalismo de Keldysh, que permite calcular de manera autoconsistente la respuesta superconductora ante distintas excitaciones dependientes del tiempo tratando el acoplamiento con el baño perturbativamente; un problema que no había sido tratado adecuadamente en la literatura existente. Dicho método puede ser fácilmente generalizado para tener en cuenta otros procesos de termalización asociados a interacciones residuales tales como electrón-electrón, electrón-fonón, impurezas, etcétera. En esta tesis en particular, hemos estudiado cómo se modifican las fases dinámicas del parámetro de orden superconductor obtenidas previamente debido al acoplamiento del sistema a un reservorio externo. En las tres fases dinámicas posibles, el parámetro de orden después de un régimen transitorio, tiende al correspondiente valor de equilibrio (el sistema termaliza) en una escala de tiempo que depende del acoplamiento del sistema con el reservorio. Si esta escala de tiempo es suficientemente chica (acoplamiento suficientemente grande) hemos demostrado que la fase de oscilaciones persistentes del parámetro de orden superconductor es una fase que sería difícil de diferenciar, por ejemplo, de las oscilaciones amortiguadas del *gap* (modo de Higgs) en experimentos reales en los que existen inevitablemente mecanismos de relajación como los considerados en esta tesis. Otro resultado interesante es que la fase superconductora de *gap* nulo resulta ser solo un efecto transitorio en presencia de los efectos del baño y que pasado cierto tiempo (que depende del acoplamiento con el baño) el parámetro de orden vuelve a ser mayor que cero; el sistema gana energía formando otra vez pares de Cooper estableciéndose un orden de largo alcance lo cual representa una especie de inestabilidad de Cooper dinámica.

En una segunda etapa, consideramos distintos tipos de perturbaciones periódicas

dependientes del tiempo haciendo especial énfasis en la posibilidad de modular la interacción atractiva de un superconductor como función del tiempo. En este caso, estudiamos la respuesta dinámica del parámetro de orden primero en ausencia de un reservorio externo para después analizar los efectos que introduce el acoplamiento del sistema con un baño térmico. El resultado más interesante es la aparición de un nuevo modo de oscilación en la amplitud del parámetro de orden superconductor llamado Rabi-Higgs. Dicho modo no lineal de baja energía puede ser obtenido también usando otros tipos de excitación (modulación de la DOS, radiación en el rango de los THz, dispersión Raman impulsiva, etcétera). Hemos demostrado que se trata de un modo que surge como consecuencia de un fenómeno resonante análogo al fenómeno de resonancia magnética nuclear que ocurre para un espín usual en presencia de un campo magnético alterno en resonancia con la frecuencia de Larmor. La diferencia en este caso es que, los pseudoespines que describen al superconductor se sincronizan debido a la autoconsistencia del problema, dando lugar a una respuesta no lineal que involucra a todos los grados de libertad y por tanto el surgimiento de un modo colectivo de excitación. La analogía con la física del sistema de dos niveles marca un interesante precedente para estudiar el efecto que producen otros protocolos, bien conocidos en el ámbito de la óptica cuántica, en la dinámica del *gap* superconductor. Como una aplicación interesante de la existencia de oscilaciones de Rabi-Higgs hemos demostrado que dicho modo permite el acceso a todas las fases dinámicas del *gap* superconductor discutidas previamente (fases I, II y III). Controlando el tiempo en el cual actúa la perturbación periódica podemos preparar al sistema con distintas texturas de pseudoespín para la subsiguiente evolución libre, lo cual permite la obtención de oscilaciones amortiguadas, oscilaciones persistentes del *gap* o bien una fase de *gap* nulo en sistemas de materia condensada sin necesidad de acudir a protocolos de cambios súbitos grandes de la interacción atractiva que solo pueden ser implementados en sistemas de átomos ultrafríos.

En una última etapa acoplamos el superconductor BCS fuera de equilibrio a un reservorio externo cuya función principal es absorber la energía extra permitiendo al sistema alcanzar un estado estacionario. En este caso, hemos demostrado que las oscilaciones de Rabi se vuelven un efecto transitorio, de modo similar a lo que ocurre en un sistema de dos niveles en presencia de radiación y relajación de energía. De este modo, es posible observar dichas oscilaciones en la medida que el período de Rabi-Higgs sea más chico que la escala de tiempo característica de la relajación de energía ($\sim 1/\gamma$), donde γ es el acoplamiento con el baño (por ejemplo; un sistema débilmente acoplado al reservorio y sujeto a perturbaciones suficientemente intensas). Después de dicho régimen transitorio de oscilaciones de Rabi-Higgs, el sistema llega a un estado estacionario en el que el parámetro de orden oscila solamente con la frecuencia de la perturbación externa (el sistema se sincroniza con el

estímulo externo). En dicho régimen, también es posible observar fenómenos no lineales para amplitudes suficientemente grandes de la perturbación en analogía con lo que sucede en un sistema de dos niveles. En este caso, el desbalance de población de cuasipartículas en resonancia con la perturbación satura imposibilitando una inversión de población a tiempos largos.

Dado que las oscilaciones de Rabi-Higgs están asociadas con fluctuaciones de carga (inversión cíclica de la población de cuasipartículas) en la última parte de este trabajo demostramos cómo ambas no linealidades (transitoria y estacionaria) pueden ser detectadas con técnicas de espectroscopías con resolución temporal. En particular, hemos discernido cuáles son las características principales de estas no linealidades que son visibles en las magnitudes que se miden usando técnicas como tr-ARPES y STM. Además, hemos enfatizado que cada una de estas espectroscopías actualmente posee una resolución temporal suficientemente alta como para detectar la dinámica transitoria de oscilaciones de Rabi-Higgs y por supuesto detectar no linealidades tales como la saturación de la población de cuasipartículas como función del tiempo.

Los fenómenos no lineales discutidos en esta tesis son ejemplos de control cuántico del estado superconductor que permiten, por ejemplo, la obtención de todas las fases dinámicas discutidas previamente en la literatura (fase I, II y III). La analogía con el sistema de dos niveles puede ser de utilidad para explorar otras formas de control preciso utilizadas en el ámbito de la óptica cuántica. Un aspecto a señalar es que durante toda la tesis nos hemos concentrado en la formulación BCS para la superconductividad pensando en superconductores de *gap* isotrópico. Una posible extensión de los resultados obtenidos aquí, al caso de superconductores con otras simetrías (por ejemplo *d-wave*) es un interesante próximo paso. En este caso, uno espera que los distintos modos de oscilación y la existencia de modos Rabi-Higgs podrían ser de más corta duración (oscilaciones que se amortiguan más rápidamente) como ha sido obtenido para el problema de cambio súbito de la interacción atractiva [80]. Para esta simetría (*d-wave*), la densidad de estados diverge logarítmicamente para $\omega \rightarrow 2\Delta$ (siendo Δ el valor máximo del *gap* superconductor) y es finita para energías menores que Δ similar a lo que sucede si consideramos el sistema acoplado a un baño térmico. Esto introduce una fuente de desfase intrínseca adicional debido a la anisotropía en el espacio k . Estudiar el proceso de termalización en condiciones más generales; en las que no solo existe un reservorio o baño externo sino también interacciones que van más allá de la descripción BCS y que hacen al problema un problema de muchos cuerpos fuera de equilibrio, es también uno de los tópicos a analizar en trabajos futuros. En este caso, el hamiltoniano deja de ser integrable y uno espera que existan fenómenos de calentamiento debido a la presencia de otros grados de libertad. Incluir efectos de desorden y explorar la posibilidad de

localización de muchos cuerpos en este contexto consituye un problema desafiante e interesante que será abordado en próximos trabajos.

Apéndice A

Apéndices

A.1. Mecanismos para inducir $\lambda(t)$ (caso del FeSe)

Para el FeSe [121], la temperatura crítica cambia de $T_c = 12^\circ K$ para $z = 1.457 \text{ \AA}$, a $T_c = 34^\circ K$ para $z = 1.427 \text{ \AA}$, donde z es la altura del Se medido desde el plano que forman los átomos de Fe. Esto se ha demostrado en experimentos bajo presión donde se argumenta que la mejora en la T_c tiene su origen en el cambio de la estructura cristalina dado que la densidad total de portadores de una capa de FeSe no cambia al cambiar la presión. Por lo tanto, este material es particularmente atractivo para modular el parámetro de orden a través de una distorsión de la red, dependiente del tiempo. Como un orden de magnitud estimado, los números citados arriba equivalen a una tasa de cambio de T_c con la altura del anión de $7^\circ K/\text{pm}$.

Al excitar al FeSe con un pulso de luz infrarroja de 1.5 eV y una intensidad de aproximadamente $0.46 \text{ mJ}/\text{cm}^2$ Gerber y colaboradores encontraron que se alcanza una amplitud de $\pm 0.25 \text{ pm}$ para el fonón A_{1g} que oscila a una frecuencia $\omega_d = 5.3 \text{ THz}$ [168]. En el límite estático, dicho desplazamiento correspondería a una variación de $T_c \sim \pm 2^\circ K$ que se traduce en una variación de aproximadamente 10% en el *gap* de equilibrio a temperatura cero. Dado que los cambios en la DOS, dentro de la teoría de banda, no son de ese orden, es natural suponer que tales variaciones fuertes se deben a cambios inducidos por los fonones en la interacción atractiva como se explicó anteriormente. Para estimar el cambio en λ , usaremos en primera aproximación, la función termodinámica BCS del *gap* con lo cual $\delta\lambda/\lambda = N_0\lambda\delta\Delta/\Delta$ donde N_0 es la densidad de estado en el nivel de Fermi. Como $N_0\lambda < 1$, los cambios en λ son menores al 10% .

La intensidad utilizada en Ref. [168] es bastante cercana a la que se usó en Ref. [66] ($0.3 \text{ mJ}/\text{cm}^2$) para observar las oscilaciones del condensado superconductor en cupratos ($T_c = 40^\circ K$). Por lo tanto, también es razonable suponer que una intensidad similar en un superconductor de FeSe no destruirá el condensado superconductor.

Debemos tener en cuenta que el mecanismo de ISRS para excitar al fonón no requiere absorción. Por lo tanto, la energía depositada en la muestra podría minimizarse aún más, ajustando la energía de excitación del láser a una región de energía transparente del material, permitiendo en principio aumentar la amplitud de la oscilación sin calentamiento.

En el FeSe se obtiene un fuerte incremento en la T_c en equilibrio al disminuir el espesor de la muestra. En este caso, T_c cambia de 8 °K para muestras con multicapas a 77 °K para una monocapa sobre SrTiO₃ que corresponde a una variación similar del parámetro de orden superconductor. Por lo tanto, controlando el grosor de la muestra y suponiendo que la frecuencia de los fonones no cambia mucho, existe un amplio rango de $\omega_d/2\Delta_0 \sim 1 - 10$ que es accesible experimentalmente y que vale la pena explorar en simulaciones numéricas.

Bibliografía

- [1] Lambert, N., Chen, Y.-N., Cheng, Y.-C., Li, C.-M., Chen, G.-Y., Nori, F. Quantum biology. *Nat. Phys.*, **9** (1), 10–18, jan 2013. URL <http://www.nature.com/articles/nphys2474>.
- [2] Levskaia, A., Weiner, O. D., Lim, W. A., Voigt, C. A. Spatiotemporal control of cell signalling using a light-switchable protein interaction. *Nature*, **461** (7266), 997–1001, oct 2009. URL <http://www.nature.com/articles/nature08446>.
- [3] Fontcuberta i Morral, A., Stellacci, F. Ultrastrong routes to new chemistry. *Nat. Mater.*, **11** (4), 272–273, apr 2012. URL <http://www.nature.com/articles/nmat3284>.
- [4] Herrera, F., Spano, F. C. Cavity-Controlled Chemistry in Molecular Ensembles. *Phys. Rev. Lett.*, **116** (23), 238301, jun 2016. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.116.238301>.
- [5] Oka, T., Kitamura, S. Floquet Engineering of Quantum Materials. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, **10** (1), 387–408, mar 2019. URL <https://www.annualreviews.org/doi/10.1146/annurev-conmatphys-031218-013423>.
- [6] Seetharam, K. I., Bardyn, C.-E., Lindner, N. H., Rudner, M. S., Refael, G. Controlled Population of Floquet-Bloch States via Coupling to Bose and Fermi Baths. *Phys. Rev. X*, **5** (4), 041050, dec 2015. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.5.041050>.
- [7] Giannetti, C., Capone, M., Fausti, D., Fabrizio, M., Parmigiani, F., Mihailovic, D. Ultrafast optical spectroscopy of strongly correlated materials and high-temperature superconductors: a non-equilibrium approach. *Adv. Phys.*, **65** (2), 58–238, mar 2016. URL <http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00018732.2016.1194044>.

- [8] Li, X., Qiu, T., Zhang, J., Baldini, E., Lu, J., Rappe, A. M., *et al.* Terahertz field-induced ferroelectricity in quantum paraelectric SrTiO₃. *Science*, **364** (6445), 1079–1082, jun 2019. URL <http://www.sciencemag.org/lookup/doi/10.1126/science.aaw4913>.
- [9] Fausti, D., Tobey, R. I., Dean, N., Kaiser, S., Dienst, A., Hoffmann, M. C., *et al.* Light-Induced Superconductivity in a Stripe-Ordered Cuprate. *Science*, **331** (6014), 189–191, jan 2011. URL <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.1197294>.
- [10] Mankowsky, R., Subedi, A., Först, M., Mariager, S. O., Chollet, M., Lemke, H. T., *et al.* Nonlinear lattice dynamics as a basis for enhanced superconductivity in YBa₂Cu₃O_{6.5}. *Nature*, **516** (7529), 71–73, dec 2014. URL <http://www.nature.com/articles/nature13875>.
- [11] Matsunaga, R., Tsuji, N., Fujita, H., Sugioka, A., Makise, K., Uzawa, Y., *et al.* Light-induced collective pseudospin precession resonating with Higgs mode in a superconductor. *Science*, **345** (6201), 1145–1149, sep 2014. URL <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.1254697>.
- [12] Matsunaga, R., Hamada, Y. I., Makise, K., Uzawa, Y., Terai, H., Wang, Z., *et al.* Higgs Amplitude Mode in the BCS Superconductors Nb_{1-x}Ti_xN Induced by Terahertz Pulse Excitation. *Phys. Rev. Lett.*, **111** (5), 057002, jul 2013. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.057002>.
- [13] Rajasekaran, S., Okamoto, J., Mathey, L., Fechner, M., Thampy, V., Gu, G. D., *et al.* Probing optically silent superfluid stripes in cuprates. *Science*, **359** (6375), 575–579, feb 2018. URL <http://www.sciencemag.org/lookup/doi/10.1126/science.aan3438>.
- [14] Hu, W., Kaiser, S., Nicoletti, D., Hunt, C. R., Gierz, I., Hoffmann, M. C., *et al.* Optically enhanced coherent transport in YBa₂Cu₃O_{6.5} by ultrafast redistribution of interlayer coupling. *Nat. Mater.*, **13** (7), 705–711, jul 2014. URL <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/24813422>.
- [15] Mitrano, M., Cantaluppi, A., Nicoletti, D., Kaiser, S., Perucchi, A., Lupi, S., *et al.* Possible light-induced superconductivity in K₃C₆₀ at high temperature. *Nature*, **530** (7591), 461–464, feb 2016. URL <https://www.nature.com/articles/nature16522>.
- [16] Kogar, A., Zong, A., Dolgirev, P. E., Shen, X., Straquadine, J., Bie, Y.-Q., *et al.* Light-induced charge density wave in LaTe₃. *Nat. Phys.*, nov 2019. URL <http://www.nature.com/articles/s41567-019-0705-3>.

- [17] Moessner, R., Sondhi, S. L. Equilibration and order in quantum Floquet matter. *Nat. Phys.*, **13** (5), 424–428, may 2017. URL <http://www.nature.com/articles/nphys4106>.
- [18] Usaj, G., Perez-Piskunow, P. M., Foa Torres, L. E. F., Balseiro, C. A. Irradiated graphene as a tunable Floquet topological insulator. *Phys. Rev. B*, **90** (11), 115423, sep 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.115423>.
- [19] Foa Torres, L. E. F., Perez-Piskunow, P. M., Balseiro, C. A., Usaj, G. Multiterminal Conductance of a Floquet Topological Insulator. *Phys. Rev. Lett.*, **113** (26), 266801, dec 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.266801>.
- [20] Lindner, N. H., Refael, G., Galitski, V. Floquet topological insulator in semiconductor quantum wells. *Nat. Phys.*, **7** (6), 490–495, jun 2011. URL <http://www.nature.com/articles/nphys1926>.
- [21] Sias, C., Lignier, H., Singh, Y. P., Zenesini, A., Ciampini, D., Morsch, O., *et al.* Observation of Photon-Assisted Tunneling in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.*, **100** (4), 040404, feb 2008. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.040404>.
- [22] Ma, R., Tai, M. E., Preiss, P. M., Bakr, W. S., Simon, J., Greiner, M. Photon-Assisted Tunneling in a Biased Strongly Correlated Bose Gas. *Phys. Rev. Lett.*, **107** (9), 095301, aug 2011. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.107.095301>.
- [23] Grifoni, M., Hänggi, P. Driven quantum tunneling. *Phys. Rep.*, **304** (5-6), 229–354, oct 1998. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0370157398000222>.
- [24] Grossmann, F., Dittrich, T., Jung, P., Hänggi, P. Coherent destruction of tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, **67** (4), 516–519, jul 1991. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.67.516>.
- [25] Kierig, E., Schnorrberger, U., Schietinger, A., Tomkovic, J., Oberthaler, M. K. Single-Particle Tunneling in Strongly Driven Double-Well Potentials. *Phys. Rev. Lett.*, **100** (19), 190405, may 2008. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.190405>.
- [26] Jiménez-García, K., LeBlanc, L. J., Williams, R. A., Beeler, M. C., Qu, C., Gong, M., *et al.* Tunable Spin-Orbit Coupling via Strong Driving in Ultracold-Atom

- Systems. *Phys. Rev. Lett.*, **114** (12), 125301, mar 2015. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.125301>.
- [27] McIver, J. W., Schulte, B., Stein, F.-U., Matsuyama, T., Jotzu, G., Meier, G., *et al.* Light-induced anomalous Hall effect in graphene. *Nat. Phys.*, nov 2019. URL <http://www.nature.com/articles/s41567-019-0698-y>.
- [28] Wilczek, F. Quantum Time Crystals. *Phys. Rev. Lett.*, **109** (16), 160401, oct 2012. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.160401>.
- [29] Else, D. V., Bauer, B., Nayak, C. Floquet Time Crystals. *Phys. Rev. Lett.*, **117** (9), 090402, aug 2016. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.117.090402>.
- [30] Zhang, J., Hess, P. W., Kyprianidis, A., Becker, P., Lee, A., Smith, J., *et al.* Observation of a discrete time crystal. *Nature*, **543** (7644), 217–220, mar 2017. URL <http://www.nature.com/articles/nature21413>.
- [31] Autti, S., Eltsov, V. B., Volovik, G. E. Observation of a Time Quasicrystal and Its Transition to a Superfluid Time Crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **120** (21), 215301, 2018. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.215301>.
- [32] Choi, S., Choi, J., Landig, R., Kucsko, G., Zhou, H., Isoya, J., *et al.* Observation of discrete time-crystalline order in a disordered dipolar many-body system. *Nature*, **543** (7644), 221–225, mar 2017. URL <http://www.nature.com/articles/nature21426>.
- [33] Bukov, M., D'Alessio, L., Polkovnikov, A. Universal high-frequency behavior of periodically driven systems: from dynamical stabilization to Floquet engineering. *Adv. Phys.*, **64** (2), 139–226, mar 2015. URL <http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00018732.2015.1055918>.
- [34] Claeys, P. W., Pandey, M., Sels, D., Polkovnikov, A. Floquet-Engineering Counterdiabatic Protocols in Quantum Many-Body Systems. *Phys. Rev. Lett.*, **123** (9), 090602, 2019. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.090602>.
- [35] Meinert, F., Mark, M. J., Lauber, K., Daley, A. J., Nägerl, H.-C. Floquet Engineering of Correlated Tunneling in the Bose-Hubbard Model with Ultra-cold Atoms. *Phys. Rev. Lett.*, **116** (20), 205301, may 2016. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.116.205301>.

- [36] Görg, F., Messer, M., Sandholzer, K., Jotzu, G., Desbuquois, R., Esslinger, T. Enhancement and sign change of magnetic correlations in a driven quantum many-body system. *Nature*, **553** (7689), 481–485, jan 2018. URL <http://www.nature.com/articles/nature25135>.
- [37] Khemani, V., Lazarides, A., Moessner, R., Sondhi, S. L. Phase Structure of Driven Quantum Systems. *Phys. Rev. Lett.*, **116** (25), 250401, jun 2016. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.116.250401>.
- [38] D’Alessio, L., Rigol, M. Long-time Behavior of Isolated Periodically Driven Interacting Lattice Systems. *Phys. Rev. X*, **4** (4), 041048, dec 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.4.041048>.
- [39] Ponte, P., Papić, Z., Huveneers, F., Abanin, D. A. Many-Body Localization in Periodically Driven Systems. *Phys. Rev. Lett.*, **114** (14), 140401, apr 2015. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.114.140401>.
- [40] Abanin, D. A., Altman, E., Bloch, I., Serbyn, M. Colloquium : Many-body localization, thermalization, and entanglement. *Rev. Mod. Phys.*, **91** (2), 21001, 2019. URL <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.91.021001>.
- [41] Abanin, D. A., De Roeck, W., Huveneers, F. Exponentially Slow Heating in Periodically Driven Many-Body Systems. *Phys. Rev. Lett.*, **115** (25), 256803, dec 2015. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.115.256803>.
- [42] Schreiber, M., Hodgman, S. S., Bordia, P., Luschen, H. P., Fischer, M. H., Vosk, R., *et al.* Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasirandom optical lattice. *Science*, **349** (6250), 842–845, aug 2015. URL <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.aaa7432>.
- [43] Choi, J.-y., Hild, S., Zeiher, J., Schauss, P., Rubio-Abadal, A., Yefsah, T., *et al.* Exploring the many-body localization transition in two dimensions. *Science*, **352** (6293), 1547–1552, jun 2016. URL <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.aaf8834>.
- [44] Wei, K. X., Ramanathan, C., Cappellaro, P. Exploring Localization in Nuclear Spin Chains. *Phys. Rev. Lett.*, **120** (7), 070501, 2018. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.070501>.
- [45] Messer, M., Sandholzer, K., Görg, F., Minguzzi, J., Desbuquois, R., Esslinger, T. Floquet Dynamics in Driven Fermi-Hubbard Systems. *Phys. Rev. Lett.*,

- 121 (23), 233603, dec 2018. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.233603>.
- [46] Dowling, J. P., Milburn, G. J. Quantum technology: the second quantum revolution. *Philos. Trans. R. Soc. London. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci.*, **361** (1809), 1655–1674, aug 2003. URL <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rsta.2003.1227>.
- [47] Dynes, R. C., Narayanamurti, V., Garno, J. P. Direct Measurement of Quasiparticle-Lifetime Broadening in a Strong-Coupled Superconductor. *Phys. Rev. Lett.*, **41** (21), 1509–1512, nov 1978. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.41.1509>.
- [48] Barankov, R. A., Levitov, L. S., Spivak, B. Z. Collective Rabi Oscillations and Solitons in a Time-Dependent BCS Pairing Problem. *Phys. Rev. Lett.*, **93** (16), 160401, oct 2004. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.160401>.
- [49] Barankov, R. A., Levitov, L. S. Synchronization in the BCS Pairing Dynamics as a Critical Phenomenon. *Phys. Rev. Lett.*, **96** (23), 230403, jun 2006. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.230403>.
- [50] Yuzbashyan, E. A., Altshuler, B. L., Kuznetsov, V. B., Enolskii, V. Z. Solution for the dynamics of the BCS and central spin problems. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **38** (36), 7831–7849, sep 2005. URL <http://stacks.iop.org/0305-4470/38/i=36/a=003?key=crossref.4050936231a03a9a53d9eb7430886252>.
- [51] Yuzbashyan, E. A., Tsyplatyev, O., Altshuler, B. L. Relaxation and Persistent Oscillations of the Order Parameter in Fermionic Condensates. *Phys. Rev. Lett.*, **96** (9), 097005, mar 2006. URL <http://dx.doi.org/10.1103/physrevlett.96.097005>.
- [52] Yuzbashyan, E. A., Dzero, M. Dynamical Vanishing of the Order Parameter in a Fermionic Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, **96** (23), 230404, jun 2006. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.230404>.
- [53] Yuzbashyan, E. A., Tsyplatyev, O., Altshuler, B. L. Erratum: Relaxation and Persistent Oscillations of the Order Parameter in Fermionic Condensates [Phys. Rev. Lett. 96 , 097005 (2006)]. *Phys. Rev. Lett.*, **96** (17), 179905, may 2006. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.179905>.

- [54] Tsuji, N., Aoki, H. Theory of Anderson pseudospin resonance with Higgs mode in superconductors. *Phys. Rev. B*, **92** (6), 064508, aug 2015. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.064508>.
- [55] Moor, A., Volkov, A. F., Efetov, K. B. Amplitude Higgs Mode and Admittance in Superconductors with a Moving Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, **118** (4), 047001, jan 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.118.047001>.
- [56] Cea, T., Castellani, C., Benfatto, L. Nonlinear optical effects and third-harmonic generation in superconductors: Cooper pairs versus Higgs mode contribution. *Phys. Rev. B*, **93** (18), 1–5, 2016.
- [57] Cea, T., Barone, P., Castellani, C., Benfatto, L. Polarization dependence of the third-harmonic generation in multiband superconductors. *Phys. Rev. B*, **97** (9), 94516, 2018. URL <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.97.094516>.
- [58] Silaev, M. Nonlinear electromagnetic response and Higgs-mode excitation in BCS superconductors with impurities. *Phys. Rev. B*, **99** (22), 224511, jun 2019. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.224511>.
- [59] Wyatt, A. F. G., Dmitriev, V. M., Moore, W. S., Sheard, F. W. Microwave-Enhanced Critical Supercurrents in Constricted Tin Films. *Phys. Rev. Lett.*, **16** (25), 1166–1169, jun 1966. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.16.1166>.
- [60] Dayem, A. H., Wiegand, J. J. Behavior of Thin-Film Superconducting Bridges in a Microwave Field. *Phys. Rev.*, **155** (2), 419–428, mar 1967. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.155.419>.
- [61] Eliashberg, G. M. Film superconductivity stimulated by a high-frequency field. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **11**, 186–188, 1970. URL http://www.jetpletters.ac.ru/ps/1716/article_{_}26086.pdf.
- [62] Tikhonov, K. S., Skvortsov, M. A., Klapwijk, T. M. Superconductivity in the presence of microwaves: Full phase diagram. *Phys. Rev. B*, **97** (18), 184516, may 2018. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.184516>.
- [63] Anderson, P. W. Random-phase approximation in the theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, **112**, 1900–1916, Dec 1958. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.112.1900>.

- [64] Volkov, A., Kogan, S. Collisionless relaxation of the energy gap in superconductors. *Sov. J. Exp. Theor. Phys.*, **38** (5), 1018, 1974. URL http://www.jetp.ac.ru/cgi-bin/dn/e/_038/_05/_1018.pdf.
- [65] Haag, J., Reiff, D. F., Dickinson, M. H., Inside, M., Vigoreaux, J. O., Sane, S. P., *et al.* Ultrafast Switching to a Stable. *Science*, **344** (April), 177–180, 2014. URL <http://science.sciencemag.org/content/344/6180/177>.
- [66] Mansart, B., Lorenzana, J., Mann, a., Odeh, a., Scarongella, M., Chergui, M., *et al.* Coupling of a high-energy excitation to superconducting quasiparticles in a cuprate from coherent charge fluctuation spectroscopy. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, **110** (12), 4539–4544, mar 2013. URL <http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1218742110>.
- [67] Stefanucci, G., van Leeuwen, R. Nonequilibrium Many-Body Theory of Quantum Systems, tomo 54. Cambridge: Cambridge University Press, 2013. URL <http://ebooks.cambridge.org/ref/id/CB09781139023979>.
- [68] Stan, A., Dahlen, N. E., van Leeuwen, R. Time propagation of the Kadanoff-Baym equations for inhomogeneous systems. *J. Chem. Phys.*, **130** (22), 224101, jun 2009. URL <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3127247>.
- [69] Myöhänen, P., Stan, A., Stefanucci, G., van Leeuwen, R. Kadanoff-Baym approach to quantum transport through interacting nanoscale systems: From the transient to the steady-state regime. *Phys. Rev. B*, **80** (11), 115107, sep 2009. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.115107>.
- [70] Dahlen, N. E., van Leeuwen, R. Solving the Kadanoff-Baym Equations for Inhomogeneous Systems: Application to Atoms and Molecules. *Phys. Rev. Lett.*, **98** (15), 153004, apr 2007. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.153004>.
- [71] Eckstein, M., Kollar, M., Werner, P. Thermalization after an Interaction Quench in the Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.*, **103** (5), 056403, jul 2009. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.056403>.
- [72] Aoki, H., Tsuji, N., Eckstein, M., Kollar, M., Oka, T., Werner, P. Nonequilibrium dynamical mean-field theory and its applications. *Rev. Mod. Phys.*, **86** (2), 779–837, jun 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.86.779>.

- [73] Amaricci, A., Weber, C., Capone, M., Kotliar, G. Approach to a stationary state in a driven Hubbard model coupled to a thermostat. *Phys. Rev. B*, **86** (8), 085110, aug 2012. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.085110>.
- [74] Amaricci, A., Capone, M. Dynamical mean-field theory description of the voltage-induced transition in a nonequilibrium superconductor. *Phys. Rev. B*, **93** (1), 014508, jan 2016. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.014508>.
- [75] Tsuji, N., Oka, T., Aoki, H. Nonequilibrium Steady State of Photoexcited Correlated Electrons in the Presence of Dissipation. *Phys. Rev. Lett.*, **103** (4), 047403, jul 2009. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.047403>.
- [76] Matthies, A., Li, J., Eckstein, M. Control of competing superconductivity and charge order by nonequilibrium currents. *Phys. Rev. B*, **98** (18), 180502, nov 2018. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.180502>.
- [77] Mazza, G. From sudden quench to adiabatic dynamics in the attractive Hubbard model. *Phys. Rev. B*, **96** (20), 205110, nov 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.205110>.
- [78] Hannibal, S., Kettmann, P., Croitoru, M. D., Axt, V. M., Kuhn, T. Dynamical vanishing of the order parameter in a confined Bardeen-Cooper-Schrieffer Fermi gas after an interaction quench. *Phys. Rev. A*, **97** (1), 013619, jan 2018. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.97.013619>.
- [79] Hannibal, S., Kettmann, P., Croitoru, M. D., Axt, V. M., Kuhn, T. Persistent oscillations of the order parameter and interaction quench phase diagram for a confined Bardeen-Cooper-Schrieffer Fermi gas. *Phys. Rev. A*, **98** (5), 053605, nov 2018. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.98.053605>.
- [80] Peronaci, F., Schiró, M., Capone, M. Transient Dynamics of d-Wave Superconductors after a Sudden Excitation. *Phys. Rev. Lett.*, **115** (25), 257001, dec 2015. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.115.257001>.
- [81] Bulla, R., Tong, N.-H., Vojta, M. Numerical renormalization group for bosonic systems and application to the sub-ohmic spin-boson model. *Phys. Rev.*

- Lett.*, **91**, 170601, Oct 2003. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.170601>.
- [82] Bulla, R., Lee, H.-J., Tong, N.-H., Vojta, M. Numerical renormalization group for quantum impurities in a bosonic bath. *Phys. Rev. B*, **71**, 045122, Jan 2005. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.045122>.
- [83] Xu, T., Morimoto, T., Lanzara, A., Moore, J. E. Efficient prediction of time- and angle-resolved photoemission spectroscopy measurements on a nonequilibrium BCS superconductor. *Phys. Rev. B*, **99** (3), 035117, Jan 2019. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.035117>.
- [84] Kennes, D. M., Wilner, E. Y., Reichman, D. R., Millis, A. J. Nonequilibrium optical conductivity: General theory and application to transient phases. *Phys. Rev. B*, **96** (5), 054506, Aug 2017. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.054506>.
- [85] Jauho, A.-P., Wingreen, N. S., Meir, Y. Time-dependent transport in interacting and noninteracting resonant-tunneling systems. *Phys. Rev. B*, **50** (8), 5528–5544, Aug 1994. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.5528>.
- [86] Pastawski, H. M. Classical and quantum transport from generalized Landauer-Büttiker equations. II. Time-dependent resonant tunneling. *Phys. Rev. B*, **46** (7), 4053–4070, Aug 1992. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.46.4053>.
- [87] Verzijl, C. J. O., Seldenthuis, J. S., Thijssen, J. M. Applicability of the wide-band limit in DFT-based molecular transport calculations. *J. Chem. Phys.*, **138** (9), 094102, Mar 2013. URL <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4793259>.
- [88] Guo, C., Wang, K., Zerah-Harush, E., Hamill, J., Wang, B., Dubi, Y., *et al.* Molecular rectifier composed of DNA with high rectification ratio enabled by intercalation. *Nat. Chem.*, **8** (5), 484–490, May 2016. URL <http://www.nature.com/articles/nchem.2480>.
- [89] Frisenda, R., Janssen, V. A. E. C., Grozema, F. C., van der Zant, H. S. J., Renaud, N. Mechanically controlled quantum interference in individual π -stacked dimers. *Nat. Chem.*, **8** (12), 1099–1104, Dec 2016. URL <http://www.nature.com/articles/nchem.2588>.

- [90] Herman, F., Hlubina, R. Microscopic interpretation of the Dynes formula for the tunneling density of states. *Phys. Rev. B*, **94** (14), 144508, oct 2016. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.144508>.
- [91] Herman, F., Hlubina, R. Thermodynamic properties of Dynes superconductors. *Phys. Rev. B*, **97** (1), 014517, jan 2018. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.014517>.
- [92] Mikhailovsky, A., Shulga, S., Karakozov, A., Dolgov, O., Maksimov, E. Thermal pair-breaking in superconductors with strong electron-phonon interaction. *Solid State Commun.*, **80** (7), 511–515, nov 1991. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/003810989190062Z>.
- [93] Pekola, J. P., Maisi, V. F., Kafanov, S., Chekurov, N., Kemppinen, A., Pashkin, Y. A., *et al.* Environment-Assisted Tunneling as an Origin of the Dynes Density of States. *Phys. Rev. Lett.*, **105** (2), 026803, jul 2010. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.026803>.
- [94] Gurarie, V. Nonequilibrium Dynamics of Weakly and Strongly Paired Superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, **103** (7), 075301, aug 2009. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.075301>.
- [95] Barankov, R. A., Levitov, L. S. Excitation of the dissipationless Higgs mode in a fermionic condensate. págs. 1–5, apr 2007. URL <http://arxiv.org/abs/0704.1292>.
- [96] Zachmann, M., Croitoru, M. D., Vagov, A., Axt, V. M., Papenkort, T., Kuhn, T. Ultrafast terahertz-field-induced dynamics of superconducting bulk and quasi-1D samples. *New J. Phys.*, **15** (5), 055016, may 2013. URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/15/i=5/a=055016?key=crossref.bbaec248fa0e2ab4fed3f48807b5eb99>.
- [97] Wendin, G. Quantum information processing with superconducting circuits: a review. *Reports Prog. Phys.*, **80** (10), 106001, oct 2017. URL <http://stacks.iop.org/0034-4885/80/i=10/a=106001?key=crossref.c62bd2db0f55f28063f06e8a7f7e3c02>.
- [98] Dynes, R. C., Narayanamurti, V., Garno, J. P. Direct Measurement of Quasiparticle-Lifetime Broadening in a Strong-Coupled Superconductor. *Phys. Rev. Lett.*, **41** (21), 1509–1512, nov 1978. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.41.1509>.

- [99] Sentef, M. A., Tokuno, A., Georges, A., Kollath, C. Theory of Laser-Controlled Competing Superconducting and Charge Orders. *Phys. Rev. Lett.*, **118** (8), 087002, feb 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.118.087002>.
- [100] Chin, C., Grimm, R., Julienne, P., Tiesinga, E. Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, **82** (2), 1225–1286, apr 2010. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.1225>.
- [101] Bloch, I., Dalibard, J., Zwirger, W. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, **80** (3), 885–964, jul 2008. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.885>.
- [102] Balseiro, C. A., Falicov, L. M. Phonon Raman scattering in superconductors. *Phys. Rev. Lett.*, **45** (8), 662–665, aug 1980. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.662>.
- [103] Littlewood, P. B., Varma, C. M. Amplitude collective modes in superconductors and their coupling to charge-density waves. *Phys. Rev. B*, **26** (9), 4883–4893, nov 1982. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.26.4883>.
- [104] Lorenzana, J., Mansart, B., Mann, A., Odeh, A., Chergui, M., Carbone, F. Investigating pairing interactions with coherent charge fluctuation spectroscopy. *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, **222** (5), 1223–1239, jul 2013. URL <http://link.springer.com/10.1140/epjst/e2013-01917-9>.
- [105] Xi, X., Carr, G. L. A THz time-domain susceptibility for superconductors including strong-current effects. *Supercond. Sci. Technol.*, **26** (11), 114001, nov 2013. URL <http://stacks.iop.org/0953-2048/26/i=11/a=114001?key=crossref.c877628486f66385468ce9cf9f64bebf>.
- [106] Papenkort, T., Axt, V. M., Kuhn, T. Coherent dynamics and pump-probe spectra of BCS superconductors. *Phys. Rev. B*, **76** (22), 224522, dec 2007. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.76.224522>.
- [107] Papenkort, T., Kuhn, T., Axt, V. M. Coherent control of the gap dynamics of BCS superconductors in the nonadiabatic regime. *Phys. Rev. B*, **78** (13), 132505, oct 2008. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.132505>.
- [108] Krull, H. Conductivity of strongly pumped superconductors: An electron-phonon system far from equilibrium. Tesis Doctoral, Fakultät Physik

- der Technischen Universität Dortmund, 2014. URL <https://eldorado.tu-dortmund.de/bitstream/2003/33996/1/Dissertation.pdf>.
- [109] Devereaux, T. P., Einzel, D. Electronic Raman scattering in superconductors as a probe of anisotropic electron pairing. *Phys. Rev. B*, **51** (22), 16336–16357, jun 1995. URL <http://dx.doi.org/10.1103/physrevb.51.16336>.
- [110] Maiti, S., Chubukov, A. V., Hirschfeld, P. J. Conservation laws, vertex corrections, and screening in Raman spectroscopy. *Phys. Rev. B*, **96** (1), 014503, jul 2017. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.014503>.
- [111] Cea, T., Benfatto, L. Signature of the Leggett mode in the A_{1g} Raman response: From MgB₂ to iron-based superconductors. *Phys. Rev. B*, **94** (6), 64512, aug 2016. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.064512>.
- [112] Bünemann, J., Seibold, G. Charge and pairing dynamics in the attractive Hubbard model: Mode coupling and the validity of linear-response theory. *Phys. Rev. B*, **96** (24), 245139, dec 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.96.245139>.
- [113] Browne, D. A., Levin, K. Collective modes in charge-density-wave superconductors. *Phys. Rev. B*, **28** (7), 4029–4032, oct 1983. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.28.4029>.
- [114] Cea, T., Benfatto, L. Nature and Raman signatures of the Higgs amplitude mode in the coexisting superconducting and charge-density-wave state. *Phys. Rev. B*, **90** (22), 224515, dec 2014. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.224515><https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.90.224515>.
- [115] Merlin, R. Generating coherent THz phonons with light pulses. *Solid State Commun.*, **102** (2-3), 207–220, apr 1997. URL [http://dx.doi.org/10.1016/s0038-1098\(96\)00721-1](http://dx.doi.org/10.1016/s0038-1098(96)00721-1)<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0038109896007211>.
- [116] Stevens, T. E., Kuhl, J., Merlin, R. Coherent phonon generation and the two stimulated Raman tensors. *Phys. Rev. B*, **65** (14), 144304, mar 2002. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.65.144304>.
- [117] Garrett, G. A., Rojo, A. G., Sood, A. K., Whitaker, J. F., Merlin, R. Vacuum Squeezing of Solids: Macroscopic Quantum States Driven by Light Pulses.

- Science*, **275** (5306), 1638–1640, 1997. URL <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.275.5306.1638>.
- [118] Devereaux, T. P., Hackl, R. Inelastic light scattering from correlated electrons. *Rev. Mod. Phys.*, **79**, 175–233, jan 2007. URL <http://dx.doi.org/10.1103/revmodphys.79.175>.
- [119] Mizuguchi, Y., Hara, Y., Deguchi, K., Tsuda, S., Yamaguchi, T., Takeda, K., *et al.* Anion height dependence of T_c for the Fe-based superconductor. *Supercond. Sci. Technol.*, **23** (5), 054013, may 2010. URL <http://stacks.iop.org/0953-2048/23/i=5/a=054013?key=crossref.f8a1dceb6f13639ca6c8f6d965b4c81f>.
- [120] Johnston, D. C. The puzzle of high temperature superconductivity in layered iron pnictides and chalcogenides. *Adv. Phys.*, **59** (6), 803–1061, nov 2010. URL <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00018732.2010.513480>.
- [121] Okabe, H., Takeshita, N., Horigane, K., Muranaka, T., Akimitsu, J. Pressure-induced high- T_c superconducting phase in FeSe: Correlation between anion height and T_c . *Phys. Rev. B*, **81** (20), 205119, may 2010. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.205119>.
- [122] Huang, S. X., Chien, C. L., Thampy, V., Broholm, C. Control of tetrahedral coordination and superconductivity in FeSe_{0.5}Te_{0.5} thin films. *Phys. Rev. Lett.*, **104** (21), 217002, may 2010. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.104.217002>.
- [123] Imai, Y., Nabeshima, F., Maeda, A. Comparative Review on Thin Film Growth of Iron-Based Superconductors. *Condens. Matter*, **2** (3), 25, jul 2017. URL <http://www.mdpi.com/2410-3896/2/3/25>.
- [124] Song, C.-L., Wang, Y.-L., Jiang, Y.-P., Wang, L., He, K., Chen, X., *et al.* Suppression of Superconductivity by Twin Boundaries in FeSe. *Phys. Rev. Lett.*, **109** (13), 137004, sep 2012. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.137004>.
- [125] Hashimoto, K., Kasahara, S., Katsumata, R., Mizukami, Y., Yamashita, M., Ikeda, H., *et al.* Nodal versus Nodeless Behaviors of the Order Parameters of LiFeP and LiFeAs Superconductors from Magnetic Penetration-Depth Measurements. *Phys. Rev. Lett.*, **108** (4), 047003, jan 2012. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.047003>.

- [126] Yin, Z. P., Lebègue, S., Han, M. J., Neal, B. P., Savrasov, S. Y., Pickett, W. E. Electron-hole symmetry and magnetic coupling in antiferromagnetic LaFeAsO. *Phys. Rev. Lett.*, **101** (4), 47001, jul 2008. URL <http://dx.doi.org/10.1103/physrevlett.101.047001>.
- [127] Mazin, I. I., Johannes, M. D., Boeri, L., Koepernik, K., Singh, D. J. Problems with reconciling density functional theory calculations with experiment in ferropnictides. *Phys. Rev. B*, **78** (8), 85104, aug 2008. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.085104>.
- [128] Yndurain, F., Soler, J. Anomalous electron-phonon interaction in doped LaFeAsO: First-principles calculations. *Phys. Rev. B*, **79** (13), 134506, apr 2009. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.134506>.
- [129] Sharma, S., Shallcross, S., Dewhurst, J. K., Sanna, A., Bersier, C., Massidda, S., *et al.* Magnetism in CeFeAsO_{1-x}Fx and LaFeAsO_{1-x}Fx from first principles. *Phys. Rev. B*, **80** (18), 184502, nov 2009. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.80.184502>.
- [130] Giovannetti, G., Ortix, C., Marsman, M., Capone, M., van den Brink, J., Lorenzana, J. Proximity of iron pnictide superconductors to a quantum tricritical point. *Nat. Commun.*, **2**, 398, jan 2011. URL <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms1407>.
- [131] Sadovskii, M. V. High-temperature superconductivity in monolayers FeSe. *Uspekhi Fiz. Nauk*, **186** (10), 1035–1057, oct 2016. URL <http://ufn.ru/ru/articles/2016/10/b/>.
- [132] de Gennes, P. G. Superconductivity of Metals and Alloys. New York: Benjamin, 1966.
- [133] Maier, T. A., Graser, S., Hirschfeld, P. J., Scalapino, D. J. d-wave pairing from spin fluctuations in the KxFe₂-ySe₂ superconductors. *Phys. Rev. B*, **83** (10), 100515, mar 2011. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.100515>.
- [134] Clark, L. W., Ha, L.-C., Xu, C.-Y., Chin, C. Quantum Dynamics with Spatiotemporal Control of Interactions in a Stable Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.*, **115** (15), 155301, oct 2015. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.115.155301>.
- [135] Stöferle, T., Moritz, H., Schori, C., Köhl, M., Esslinger, T. Transition from a Strongly Interacting 1D Superfluid to a Mott Insulator. *Phys. Rev. Lett.*,

- 92 (13), 130403, mar 2004. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.92.130403>.
- [136] Haller, E., Hart, R., Mark, M. J., Danzl, J. G., Reichsöllner, L., Gustavsson, M., *et al.* Pinning quantum phase transition for a Luttinger liquid of strongly interacting bosons. *Nature*, **466** (7306), 597–600, jul 2010. URL <http://www.nature.com/articles/nature09259>.
- [137] Endres, M., Fukuhara, T., Pekker, D., Cheneau, M., Schaub, P., Gross, C., *et al.* The Higgs amplitude mode at the two-dimensional superfluid/Mott insulator transition. *Nature*, **487** (7408), 454–458, jul 2012. URL <http://www.nature.com/articles/nature11255>.
- [138] Behrle, A., Harrison, T., Kombe, J., Gao, K., Link, M., Bernier, J.-S., *et al.* Higgs mode in a strongly interacting fermionic superfluid. *Nat. Phys.*, **14** (8), 781–785, aug 2018. URL <http://www.nature.com/articles/s41567-018-0128-6>.
- [139] Kulik, I. O., Entin-Wohlman, O., Orbach, R. Pair susceptibility and mode propagation in superconductors: A microscopic approach. *J. Low Temp. Phys.*, **43** (5-6), 591–620, jun 1981. URL <http://link.springer.com/10.1007/BF00115617>.
- [140] Lazarides, A., Das, A., Moessner, R. Periodic Thermodynamics of Isolated Quantum Systems. *Phys. Rev. Lett.*, **112** (15), 150401, apr 2014. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.150401>.
- [141] Slichter, C. P. Principles of Magnetic Resonance: 3rd edition. New York: Springer-Verlag, 1990.
- [142] Chou, Y.-Z., Liao, Y., Foster, M. S. Twisting Anderson pseudospins with light: Quench dynamics in terahertz-pumped BCS superconductors. *Phys. Rev. B*, **95** (10), 104507, mar 2017. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.104507>.
- [143] Cundiff, S. T., Knorr, A., Feldmann, J., Koch, S. W., Göbel, E. O., Nickel, H. Rabi Flopping in Semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, **73** (8), 1178–1181, aug 1994. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.1178>.
- [144] Fürst, C., Leitenstorfer, A., Nutsch, A., Tränkle, G., Zrenner, A. Ultrafast Rabi Oscillations of Free-Carrier Transitions in InP. *Phys. status solidi*, **204** (1), 20–22, nov 1997.

- [145] Giessen, H., Linden, S., Kuhl, J., Knorr, A., Koch, S. W., Hetterich, M., *et al.* Coherent propagation at high intensities on a free exciton resonance in a semiconductor: self-induced transmission. *Superlattices Microstruct.*, **26** (2), 103–115, aug 1999. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0749603699907644>.
- [146] Cole, B. E., Williams, J. B., King, B. T., Sherwin, M. S., Stanley, C. R. Coherent manipulation of semiconductor quantum bits with terahertz radiation. *Nature*, **410** (6824), 60–63, mar 2001. URL <http://www.nature.com/articles/35065032>.
- [147] Stievater, T. H., Li, X., Steel, D. G., Gammon, D., Katzer, D. S., Park, D., *et al.* Rabi Oscillations of Excitons in Single Quantum Dots. *Phys. Rev. Lett.*, **87** (13), 133603, sep 2001. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.87.133603>.
- [148] Htoon, H., Takagahara, T., Kulik, D., Baklenov, O., Holmes, A. L., Shih, C. K. Interplay of Rabi Oscillations and Quantum Interference in Semiconductor Quantum Dots. *Phys. Rev. Lett.*, **88** (8), 087401, feb 2002. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.087401>.
- [149] Zrenner, A., Beham, E., Stufler, S., Findeis, F., Bichler, M., Abstreiter, G. Coherent properties of a two-level system based on a quantum-dot photodiode. *Nature*, **418** (6898), 612–614, aug 2002. URL <http://www.nature.com/articles/nature00912>.
- [150] Hahn, E. L. Spin echoes. *Phys. Rev.*, **80** (4), 580–594, 1950.
- [151] Giessen, H., Knorr, A., Haas, S., Koch, S. W., Linden, S., Kuhl, J., *et al.* Self-induced transmission on a free exciton resonance in a semiconductor. *Phys. Rev. Lett.*, **81** (19), 4260–4263, nov 1998. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.4260>.
- [152] Steck, D. A. Quantum and Atom Optics. *Book*, 2007. URL <http://atomoptics-nas.uoregon.edu/{~}dsteck/teaching/quantum-optics/quantum-optics-notes.pdf>.
- [153] Mishchenko, E. G. Dynamic Conductivity in Graphene beyond Linear Response. *Phys. Rev. Lett.*, **103** (24), 246802, dec 2009. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.103.246802>.
- [154] Saira, O.-P., Kemppinen, A., Maisi, V. F., Pekola, J. P. Vanishing quasiparticle density in a hybrid Al/Cu/Al single-electron transistor. *Phys. Rev. B*,

- 85 (1), 012504, jan 2012. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.85.012504>.
- [155] Chang, J.-J., Scalapino, D. J. Nonequilibrium superconductivity. *J. Low Temp. Phys.*, **31** (1-2), 1–32, apr 1978. URL <http://link.springer.com/10.1007/BF00116228>.
- [156] Shirley, J. H. Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time. *Phys. Rev.*, **138** (4B), B979–B987, may 1965. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.138.B979>.
- [157] Sambe, H. Steady States and Quasienergies of a Quantum-Mechanical System in an Oscillating Field. *Phys. Rev. A*, **7** (6), 2203–2213, jun 1973. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.7.2203>.
- [158] Kohler, S., Lehmann, J., Hanggi, P. Driven quantum transport on the nanoscale. *Phys. Rep.*, **406** (6), 379–443, feb 2005. URL <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0370157304005071>.
- [159] Grifoni, M., Hänggi, P. Driven quantum tunneling. *Phys. Rep.*, **304** (5-6), 229–354, oct 1998. URL [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(98\)00022-2](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(98)00022-2).
- [160] Peralta Gavensky, L., Usaj, G., Balseiro, C. A. Time-resolved Hall conductivity of pulse-driven topological quantum systems. *Phys. Rev. B*, **98** (16), 165414, oct 2018. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.98.165414>.
- [161] Morgenstern, M. STM Ready for the Time Domain. *Science*, **329** (5999), 1609–1610, sep 2010. URL <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.1194918>.
- [162] Nunes, G., Freeman, M. R. Picosecond Resolution in Scanning Tunneling Microscopy. *Science*, **262** (5136), 1029–1032, nov 1993. URL <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.262.5136.1029>.
- [163] Takeuchi, O., Aoyama, M., Oshima, R., Okada, Y., Oigawa, H., Sano, N., *et al.* Probing subpicosecond dynamics using pulsed laser combined scanning tunneling microscopy. *Appl. Phys. Lett.*, **85** (15), 3268–3270, oct 2004. URL <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.1804238>.
- [164] Garg, M., Kern, K. Attosecond coherent manipulation of electrons in tunneling microscopy. *Science*, **367** (6476), 411–415, 2020. URL <https://science.sciencemag.org/content/367/6476/411>.

-
- [165] Zmuidzinas, J., LeDuc, H. Quasi-optical slot antenna SIS mixers. *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, **40** (9), 1797–1804, 1992. URL <http://ieeexplore.ieee.org/document/156607/>.
- [166] Leridon, B. Josephson noise in quasiparticle mixers. *J. Appl. Phys.*, **81** (7), 3243–3247, apr 1997. URL <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.364354>.
- [167] Ojeda Collado, H. P., Usaj, G., Lorenzana, J., Balseiro, C. A. Fate of dynamical phases of a BCS superconductor beyond the dissipationless regime. *Phys. Rev. B*, **99** (17), 174509, may 2019. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.174509>.
- [168] Gerber, S., Yang, S.-L., Zhu, D., Soifer, H., Sobota, J. A., Rebec, S., *et al.* Femtosecond electron-phonon lock-in by photoemission and x-ray free-electron laser. *Science*, **357** (6346), 71–75, jul 2017. URL <http://www.sciencemag.org/lookup/doi/10.1126/science.aak9946>.

Publicaciones asociadas

1. **H. P. Ojeda Collado**, Gonzalo Usaj, José Lorenzana, and C. A. Balseiro “Fate of dynamical phases of a BCS superconductor beyond the dissipationless regime”, *Phys. Rev. B* 99, 174509 (2019).
2. **H. P. Ojeda Collado**, José Lorenzana, Gonzalo Usaj, and C. A. Balseiro “Population inversion and dynamical phase transitions in a driven superconductor”, *Phys. Rev. B* 98, 214519 (2018).
3. **H. P. Ojeda Collado**, Gonzalo Usaj, José Lorenzana, and C. A. Balseiro “Nonlinear dynamics of driven superconductors with dissipation”, *Phys. Rev. B* 101, 054502 (2020).

Otras publicaciones durante el período de doctorado que no han sido incluidas dentro de la presente tesis:

1. F. Munoz, **H. P. Ojeda Collado**, Gonzalo Usaj, Jorge O. Sofo, and C. A. Balseiro “Bilayer graphene under pressure: Electron-hole symmetry breaking, valley Hall effect, and Landau levels”, *Phys. Rev. B* 93, 235443 (2016). (Los dos primeros autores contribuyeron de igual forma en este trabajo)
2. Younes Henni, **Hector Pablo Ojeda Collado**, Karol Nogajewski, Maciej R. Molas, Gonzalo Usaj, Carlos A. Balseiro, Milan Orlita, Marek Potemski, and Clement Faugeras, “Rhombohedral Multilayer Graphene: A Magneto-Raman Scattering Study”, *Nano Lett.*, 2016, 16 (6), pp 3710–3716. (Primer autor en la parte teórica)

Agradecimientos

En primer lugar quiero agradecer a la Argentina y a todos los argentinos por la acogida que me dieron hace ya más de 6 años en este extraordinario lugar llamado Bariloche. Gracias por permitirme ser uno de ellos hoy en día. Estos cinco años de doctorado no hubiesen sido posible sin el apoyo de CONICET. Gracias también al Instituto Balseiro por facilitar mi formación en un ambiente de tan alto nivel profesional y humano. Quiero agradecer profundamente a mi director Carlos Balseiro por su apoyo constante y por contagiarme con esas ganas de encontrar «a cualquier costo» la solución de un problema físico por complejo que sea. He aprendido mucho en estos años a su lado. Gracias por el apoyo incondicional a mi llegada y en momentos de transición. Gracias por estar siempre presente. A Gonzalo por las muchísimas charlas sobre física, sobre cómo hacer cálculos, por sus consejos siempre tan útiles sobre física y sobre la vida del físico. A Pepe le debo más que un agradecimiento (más que muchos agradecimientos). Su contribución en los principales resultados de esta tesis fue importantísima. Su apoyo y su amistad son algunas de las cosas más valiosas que me llevo en este período. Quiero agradecer a todos los integrantes pasados y presentes del Departamento de Teoría de la Materia Condensada, Centro Atómico Bariloche. De todos aprendí mucho, de sus buenísimos cursos, de sus consejos y de las discusiones sobre física. A toda mi familia que supo soportar mi mal humor cuando los cálculos no andan bien o cuando no entendía algún resultado. Su apoyo constante durante todo este período es sin dudas lo que ha hecho posible que se concrete esta tesis. Gracias a mis hijos y a mi esposa que son el motor impulsor de mi vida. A ellos está dedicado este trabajo. A todos mis amigos, por sus pequeñas y grandes contribuciones. A Alexander, a Yuri, a Daniel, a Anita, a Franco, a Victor por todos los momentos de catarsis, discusiones interesantes sobre física, cálculos, etcétera. A todos muchas gracias.

